

Diplomarbeit

Vielteilchenwechselwirkungen von Elektronen in einem Hubbard-Cluster

Daniel Wilkin



seit 1558

Friedrich-Schiller-Universität Jena
Physikalisch-Astronomische Fakultät
Institut für Festkörpertheorie und -optik

eingereicht von: Daniel Wilkin
geboren am: 28.03.1980 in Speyer

1. Gutachter: Prof. Dr. sc. nat. Friedhelm Bechstedt
2. Gutachter: Dr. rer. nat. Karsten Hannewald

Tag der Verleihung des Diploms:

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 5 |
| 2 | Grundlagen | 7 |
| 2.1 | Fermionen | 7 |
| 2.2 | Die zweite Quantisierung | 8 |
| 2.3 | Hamilton-Operator | 10 |
| 2.4 | Das Hubbard-Modell | 11 |
| 3 | Die Greensche Funktion | 15 |
| 3.1 | Einteilchen-Greensfunktion für Fermionen für $T = 0$ | 16 |
| 3.2 | Real- und Imaginärteil der Greensfunktion | 19 |
| 4 | Das Hubbard-Molekül | 21 |
| 4.1 | Hubbard-Molekül mit einem Elektron ($N = 1$) | 22 |
| 4.2 | Hubbard-Molekül mit zwei Elektronen ($N = 2$) | 23 |
| 4.3 | Hubbard-Molekül mit drei Elektronen ($N = 3$) | 27 |
| 4.4 | Hubbard-Molekül mit null und vier Elektronen ($N = 0$ und $N = 4$) | 29 |
| 5 | Die Greensche Funktion und Spektralfunktion | 31 |
| 5.1 | Die Greenschen Funktionen für $N = 1$ | 32 |
| 5.2 | Die Greenschen Funktionen für $N = 2$ | 33 |
| 5.3 | Die Greenschen Funktionen für $N = 3$ | 34 |
| 5.4 | Eigenschaften der spektralen Gewichte | 34 |
| 5.5 | Die Spektralfunktion | 37 |
| 5.5.1 | Spektralfunktionen für $N = 1$ | 37 |
| 5.5.2 | Spektralfunktionen für $N = 2$ | 38 |
| 5.5.3 | Spektralfunktionen für $N = 3$ | 39 |
| 6 | Inverse Greensfunktionen und Selbstenergie | 41 |
| 6.1 | Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 1$ | 42 |
| 6.2 | Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 2$ | 43 |
| 6.3 | Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 3$ | 45 |
| 6.4 | Folgerungen | 46 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 7 | Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung | 49 |
| 7.1 | Hartree-Fock-Näherung für $N = 1$ Elektronen | 51 |
| 7.2 | Hartree-Fock-Näherung für $N = 2$ Elektronen | 51 |
| 7.3 | Hartree-Fock-Näherung für $N = 3$ Elektronen | 53 |
| 7.4 | Folgerungen | 53 |
| 8 | Die G_0W_0-Näherung | 59 |
| 8.1 | Zeitgeordnete Dichtekorrelationsfunktion | 59 |
| 8.2 | Dielektrische Funktion und abgeschirmte Wechselwirkung | 62 |
| 8.3 | G_0W_0 -Selbstenergie | 64 |
| 8.4 | Folgerungen | 65 |
| 9 | Zusammenfassung und Ausblick | 69 |
| A | Berechnungen zur Hamilton-Matrix | 71 |
| A.1 | Für ein Elektron ($N = 1$) | 71 |
| A.2 | Für zwei Elektronen ($N = 2$) | 72 |
| A.3 | Zur Eigenvektorberechnung | 72 |
| A.4 | Für drei Elektronen ($N = 3$) | 73 |
| B | Berechnungen zu den Greenschen Funktionen | 75 |
| B.1 | Für ein Elektron ($N = 1$) | 75 |
| B.2 | Für zwei Elektronen ($N = 2$) | 76 |
| B.3 | Für drei Elektronen ($N = 3$) | 77 |
| C | Die spektralen Gewichte | 79 |
| C.1 | Summation über die Gewichte | 79 |
| D | Zur Selbstenergie und den Greenschen Funktionen | 81 |
| D.1 | Zur Berechnung der Selbstenergie ($N = 2$) | 81 |
| D.2 | Die Real- und Imaginärteile von $\Sigma(\omega)$ | 81 |
| D.3 | Spezialfälle der Greenschen Funktionen | 83 |
| E | Zu den Spektralfunktionen | 85 |
| E.1 | Symmetrierelationen | 85 |
| E.2 | Darstellung | 85 |
| F | Zur G_0W_0-Näherung | 87 |
| F.1 | Die Berechnung von $\Sigma^{G_0W_0}(\omega)$ | 87 |
| F.2 | Real- und Imaginärteile von $\Sigma^{G_0W_0}(\omega)$ | 88 |
| F.3 | Graphische Darstellung der Imaginärteile | 89 |
| F.4 | Modifizierte Vertex-Funktionen in der G_0W_0 -Näherung | 90 |

1 Einleitung

Wechselwirkende Vielteilchen-Systeme sind in der Physik allgegenwärtig. So sind sowohl in der Festkörper- und der Kernphysik, aber auch in der Molekülphysik, viele physikalische Sachverhalte erst durch die Berücksichtigung von Vielteilchen-Wechselwirkungs-Prozessen zu erklären. Die Lösung einer entsprechenden Schrödinger-Gleichung zur exakten Beschreibung des Systems ist allerdings in den meisten Fällen nicht möglich. Daher ist es notwendig, die Wirklichkeit des betreffenden Systems im beschreibenden Modell vereinfacht darzustellen. Das heißt, man ist darauf angewiesen, Vereinfachungen und Näherungen einzuführen.

In dieser Arbeit wenden wir uns im Speziellen den Elektronen zu. Sie nehmen einen überaus gewichtigen Anteil im Bereich der Vielteilchentheorie ein, da viele physikalische Prozesse ausschließlich über Elektron-Elektron-Wechselwirkungen ablaufen. Beispielsweise sind korrelierte Elektronensysteme für Phänomene wie etwa den Magnetismus und die Supraleitung verantwortlich [Bec99, Mie01, Czy08].

Für die Theorie werden zur Beschreibung und zum Verständnis dieser Phänomene daher bestimmte Methoden und Modelle erforderlich. Eine wichtige Rolle übernimmt dabei das Hubbard-Modell [Hub63, Lie68]. Dieses kann als eines der wichtigsten Modelle zur Beschreibung von wechselwirkenden Fermionen angesehen werden, auch wenn man aufgrund der enthaltenen Vereinfachungen gewisse Einschränkungen in der physikalischen Aussagekraft hinnehmen muss. Geeignet ist das Hubbard-Modell zum Beispiel, um magnetische und elektrische Eigenschaften, insbesondere bei Übergangsmetallen, zu erklären.

Das Ziel dieser Arbeit besteht in der Beschreibung eines wasserstoffartigen Moleküls und seiner Ionen mit einer variierenden Anzahl von $N = 1, 2, 3$ Elektronen mit Hilfe des Hubbard-Modells. Dieses Modell eines sogenannten Hubbard-Clusters mit einer geringen Anzahl an Elektronen hat den Vorteil, dass es analytisch exakt lösbar ist.

So sind wir in der Lage, die exakten Energieeigenwerte und Eigenfunktionen auszurechnen. Aus dem Hamiltonoperator können somit die Greenschen Funktionen und die Spektralfunktionen abgeleitet und darüber hinaus die Selbstenergien des Systems ermittelt werden. Zudem ist es möglich, die unterschiedlichen Beiträge zur gesamten Elektron-Elektron-Wechselwirkung, also Hartree-, Austausch- und Korrelationsbeitrag, voneinander zu trennen.

Ebenfalls möchten wir die exakten Resultate mit den Ergebnissen aus zwei wichtigen Näherungsmethoden vergleichen, die in der Vielteilchen-Theorie sehr gerne zur approximativen Beschreibung verwendet werden, die Hartree-Fock-Näherung [Bec05] und die G_0W_0 -Näherung [Hed69]. Somit können also anhand dieses Hubbard-Clusters die Appro-

1 Einleitung

ximationen qualitativ überprüft werden, um abzuschätzen, welche Näherung für welchen Parameterbereich gut ist und sinnvoll erscheint.

Bei der Erstellung dieser Arbeit wurden vorwiegend die Skripte von Bechstedt [Bec99, Bec05, Bec10] und Honecker [Hon07], sowie die Lehrbücher von Schwabl [Schw08], Mahan [Mah90], Fetter/Walecka [Fet03], Czycholl [Czy08], Nolting [Nol09], Elk/Gasser [Elk79] und Doniach/Sondheimer [Don98] verwendet. Außerdem die Dissertation von Tomczak [Tom07] und ein Manuskript von Romaniello [Rom09].

2 Grundlagen

2.1 Fermionen

Elektronen gehören wie die Neutronen und die Protonen zu der Familie der Fermionen. Mit Hinblick auf die Behandlung von Elektronenkorrelationen ist es daher sinnvoll, sich mit einigen grundlegenden Eigenschaften von fermionischen Systemen vertraut zu machen. Die aufgeführten Darstellungen folgen [Schw08, Mah90, Hon07, Nol09, Fet03].

Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin. Da wir es stets mit einem System von identischen, ununterscheidbaren Teilchen zu tun haben, muss ein Symmetrieverhalten unter Teilchenvertauschung gewährleistet sein. Bei Fermionen wird gefordert, dass die Zustände eines Systems von N identischen Teilchen antisymmetrisch bei Teilchenvertauschung sind.

Ein solcher antisymmetrischer N -Teilchen-Zustand wird aus einem N -Teilchen-Produktzustand aufgebaut. Bezeichnet man mit $|k_l\rangle_{(i)}$ den Einteilchenzustand des Teilchens i , so bildet man den zunächst nicht symmetrischen N -Teilchen-Zustand als Produktzustand der N -Einteilchenzustände

$$|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle = |k_1\rangle_{(1)} |k_2\rangle_{(2)} \dots |k_N\rangle_{(N)} . \quad (2.1)$$

Aus diesem kann schließlich mit Hilfe des Antisymmetrisierungsoperators

$$\hat{\mathcal{A}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha=1}^{N!} (-1)^{p_\alpha} \mathcal{P}_\alpha \quad (2.2)$$

(mit dem Permutationsoperator \mathcal{P}_α , der Anzahl der Transpositionen p_α und der Anzahl der möglichen Permutationen $\alpha = 1, 2, \dots, N!$) ein antisymmetrischer N -Teilchen-Zustand gewonnen werden. Damit ergibt sich

$$\hat{\mathcal{A}}|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_N\rangle_a . \quad (2.3)$$

Für diesen allgemeinen N -Teilchenzustand, der alternativ auch mit Hilfe der Slaterdeterminante dargestellt werden kann, gilt somit bei einer beliebigen Paarvertauschung

$$|\dots, k_i, \dots, k_j, \dots\rangle_a = - |\dots, k_j, \dots, k_i, \dots\rangle_a . \quad (2.4)$$

Die soeben aufgeführte Antisymmetrievorschrift führt automatisch zum Pauli-Prinzip. Ein Einteilchenzustand $|k_l\rangle$ darf demnach nie doppelt besetzt sein.

2 Grundlagen

Im Allgemeinen bietet es sich an, die Zustände durch die Angabe von Besetzungszahlen anzugeben, wodurch sich ein Zustand durch $|n_1, n_2, \dots\rangle$ charakterisieren lässt. Die Größe n_i bezeichnet dabei die Teilchenzahl für den Zustand i , und diese kann bei Fermionen nur die Werte 0 und 1 annehmen. Ein antisymmetrischer N -Teilchen-Zustand ist somit offensichtlich eindeutig durch die Angabe dieser Besetzungszahlen darstellbar:

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_a \equiv |k_1, k_2, \dots, k_N\rangle_a. \quad (2.5)$$

Alle Zustände eines N -Teilchen-Systems gehören zum Hilbertraum $\mathcal{H}_a^{(N)}$, der ausschließlich die total antisymmetrischen Zustände beinhaltet. Auf diesem Raum ist die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \dots |n_1, n_2, \dots\rangle_a {}_a \langle n_1, n_2, \dots| = \mathbb{1}_a. \quad (2.6)$$

unter der Nebenbedingung $\sum_i n_i = N$ gültig.

2.2 Die zweite Quantisierung

Möchte man Zustände mit beliebiger Teilchenzahl zulassen, so ist der N -Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}_a^{(N)}$ zur physikalischen Beschreibung nicht mehr ausreichend. Deshalb müssen wir an dieser Stelle den Fockraum \mathcal{F} einführen, in dem alle Zustände mit beliebiger Teilchenzahl enthalten sind:

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}^{(1)} \oplus \mathcal{H}_a^{(2)} \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_a^{(N)} \oplus \dots \quad (2.7)$$

Man bildet gemäß Gleichung (2.7) die direkte Summe aus den Zustandsräumen mit unterschiedlicher Teilchenzahl $N = 0, 1, 2, 3, \dots$.

In diesem Raum kann man ein Skalarprodukt wie folgt festlegen:

$$\begin{aligned} {}_a \langle n_1, n_2, \dots | n'_1, n'_2, \dots \rangle_a &= \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \\ {}_a \langle n_1, n_2, \dots, n_M | n'_1, n'_2, \dots, n'_N \rangle_a &= 0 \quad \text{für } N \neq M. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Für unterschiedliche Teilchenzahlen verschwindet das Skalarprodukt, während für gleiche Teilchenzahlen das bisherige Skalarprodukt der jeweiligen Hilberträume angewendet wird. Damit haben wir ein vollständiges Orthonormalsystem, indem die Orthogonalitätsrelation und natürlich auch die Vollständigkeitsrelation aus Gleichung (2.6) erfüllt sind.

Der Formalismus der zweiten Quantisierung ist in der Vielteilchentheorie eine gängige Methode, um physikalische Prozesse zu beschreiben. Der Vorteil dabei besteht in der besseren und einfacheren Beschreibung der Viel-Teilchen-Systeme. Mit der zweiten Quantisierung unmittelbar verbunden ist die Einführung der sogenannten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

2.2 Die zweite Quantisierung

Der Erzeugungsoperator c_i^\dagger bewirkt die Überführung eines N -Teilchen-Zustandes in einen $N+1$ -Teilchen-Zustand. Auf diese Weise schafft man eine Verbindung zwischen den unterschiedlichen Hilberträumen $\mathcal{H}_a^{(N)}$ und $\mathcal{H}_a^{(N+1)}$. Durch die Wirkung auf einen beliebigen Zustand wird der Erzeugungsoperator c_i^\dagger definiert:

$$c_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle_a = (1 - n_i) \cdot (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle_a . \quad (2.9)$$

Analog dazu bewirkt der Vernichtungsoperator c_i den Übergang vom N -Teilchen-Raum $\mathcal{H}_a^{(N)}$ zum $N-1$ -Teilchen-Raum $\mathcal{H}_a^{(N-1)}$, und es gilt

$$c_i |\dots, n_i, \dots\rangle_a = n_i \cdot (-1)^{\sum_{j<i} n_j} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle_a . \quad (2.10)$$

Vereinfacht und übersichtlich dargestellt gilt also offensichtlich

$$\begin{aligned} c_i |\dots, 1_i, \dots\rangle_a &= \pm |\dots, 0_i, \dots\rangle_a & c_i^\dagger |\dots, 1_i, \dots\rangle_a &= 0 \\ c_i |\dots, 0_i, \dots\rangle_a &= 0 & c_i^\dagger |\dots, 0_i, \dots\rangle_a &= \pm |\dots, 1_i, \dots\rangle_a . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Der Operator c_i^\dagger erzeugt demnach ein Teilchen im Zustand $|i\rangle$, sofern dieser unbesetzt ist und erhöht damit die Teilchenzahl um Eins. Andernfalls ergibt sich Null. Bei der Anwendung von c_i wird dagegen bei einem besetzten Zustand $|i\rangle$ ein Teilchen vernichtet und die Besetzungszahl um Eins erniedrigt, während die Anwendung auf einen unbesetzten Zustand wiederum Null ergibt.

Mit Hilfe dieser Erzeugungsoperatoren können nun aus dem Vakuumzustand $|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle$ alle Basiszustände (Einteilchenzustände, Zweiteilchenzustände, ...) konstruiert werden

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle_a = c_1^\dagger c_2^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle . \quad (2.12)$$

In unserem Fall wird sehr oft mit der Orts-Spin-Darstellung gearbeitet. Das bedeutet, dass ein Zustand durch eine Ortskomponente i und eine Spinquantenzahl σ charakterisiert wird und die Operatoren auf die Orts- und Spineigenzustände $|\mathbf{x}, \sigma\rangle$ Einfluss nehmen.

In dieser Darstellung ergeben sich unmittelbar aus den Definitionen (2.9) und (2.10) die Antivertauschungsrelationen für Fermionen

$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij} \quad \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = 0 \quad \{c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 . \quad (2.13)$$

Dabei werden im folgenden die Orte bzw. die Gitterplätze \mathbf{x}_i kurzerhand mit i bezeichnet. Ein auch beim Hubbard-Modell häufig verwendeter Operator ist der Teilchenzahloperator (oder Besetzungszahloperator), der durch

$$\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (2.14)$$

gegeben ist. Bei Anwendung auf einen allgemeinen Mehrteilchenzustand ergibt sich die folgende Eigenwertgleichung

$$\hat{n}_{i\sigma} |\dots, n_{i\sigma}, \dots\rangle_a = n_{i\sigma} |\dots, n_{i\sigma}, \dots\rangle_a . \quad (2.15)$$

2 Grundlagen

Offensichtlich ist die Teilchenzahl $n_{i\sigma}$ Eigenwert zum Zustand $|i, \sigma\rangle$ und die Fock-Zustände $|\dots, n_{i\sigma}, \dots\rangle$ sind Eigenzustände des Operators $\hat{n}_{i\sigma}$.

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden in unserem Fall auf Einteilchenbasiszustände, die aus Orts- und Spineigenzuständen aufgebaut sind, angewandt. Mit den Spinvariablen α, β sind diese Feldoperatoren $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ und $\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x})$ wie folgt definiert:

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma} \varphi_{i\sigma}(\mathbf{x}, \alpha) \quad (2.16)$$

$$\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger \varphi_{i\sigma}^*(\mathbf{x}, \alpha) . \quad (2.17)$$

hierbei sind die Koeffizienten $\varphi_{i\sigma}(\mathbf{x}, \alpha)$ und $\varphi_{i\sigma}^*(\mathbf{x}, \alpha)$ Einteilchen-Wellenfunktionen in der Orts-Spin-Darstellung und bilden ein vollständiges Basissystem.

Auch hier gelten wieder die bekannten Antivertauschungsrelationen wie bei den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\{\psi_\alpha(\mathbf{x}), \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.18)$$

$$\{\psi_\alpha(\mathbf{x}), \psi_\beta(\mathbf{x}')\} = 0 \quad (2.19)$$

$$\{\psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}), \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}')\} = 0 . \quad (2.20)$$

Hierbei tritt der Antikommutator in Erscheinung, der für die beiden Operatoren A und B durch

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \quad (2.21)$$

definiert ist.

2.3 Hamilton-Operator

Unser Ziel ist es, den Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkung anhand eines kleinen N -Elektronensystems zu untersuchen. Unter Berücksichtigung der abstoßenden Coulombwechselwirkung betrachten wir dazu den entsprechenden Hamiltonoperator im Formalismus der ersten Quantisierung

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{x}_i) \right) + \sum_{i<j} U(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) . \\ &= \sum_{i=1}^N t(i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U(i, j) = T + U , \end{aligned} \quad (2.22)$$

mit dem Impuls- und Ortsoperator für das i -te Teilchen, \mathbf{p}_i und \mathbf{x}_i . Das Potential $V(\mathbf{x}_i)$ beinhaltet die Wirkung der Kerne oder Atomrümpfe und die Größe

$$U(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{e^2}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} \quad (2.23)$$

berücksichtigt mit der Ladung e die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen in Form der Coulomb-Abstoßung. Der Hamiltonoperator ist demnach aus einem Einteilchen- sowie einem Zweiteilchenoperator aufgebaut.

Zur besseren Beschreibung der Wechselwirkungsprozesse wird der Hamilton-Operator im Formalismus der zweiten Quantisierung, auch Besetzungszahldarstellung genannt, aufgeschrieben. Damit können wir unsere Operatoren mit Hilfe der Feldoperatoren bzw. mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken und der Hamilton-Operator erhält die Form:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}') \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi_{\beta}(\mathbf{x}') \psi_{\alpha}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.24)$$

In der diskreten Einteilchen-Eigenbasis $\{|k\rangle\}$ von $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x})$ kann man dies schreiben als

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^{\dagger} c_k + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} u_{k_1, k_2, k_3, k_4} c_{k_1}^{\dagger} c_{k_2}^{\dagger} c_{k_4} c_{k_3} \quad (2.25)$$

mit dem Wechselwirkungsmatrixelement

$$u_{k_1, k_2, k_3, k_4} = \sum_{\alpha, \beta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_{k_1}^*(\mathbf{x})^{\alpha} \varphi_{k_2}^*(\mathbf{x}')^{\beta} U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \varphi_{k_3}(\mathbf{x}')^{\beta} \varphi_{k_4}(\mathbf{x})^{\alpha} \quad (2.26)$$

und seinen Eigenwerten ϵ_k (mit k als dem Satz der Einteilchen-Quantenzahlen einschließlich einer Spinquantenzahl). Um diesen Hamilton-Operator behandeln zu können, müssen Näherungen und Vereinfachungen vorgenommen werden, denn anderenfalls ist ein solch allgemeiner Ausdruck nicht lösbar. Unsere angestrebte exakte Lösung des Elektronenproblem basiert auf der Modellierung mit Hilfe des Hubbard-Modells.

2.4 Das Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell ist ein Modell in der Vielteilchenphysik, das zur Beschreibung von Wechselwirkungsprozessen und den damit verbundenen Phänomenen bei Elektronen dient. Hauptanwendungsgebiete sind zum Beispiel Betrachtungen zum Ferromagnetismus, zu den

2 Grundlagen

Übergangsmetallen und zum Metall-Isolator-Übergang. Es ist sogar auch möglich, Supraleitung mit Hilfe dieses Modelles darzustellen [Mie01].

Bei diesem Modell betrachtet man Atome auf einem Gitter, bei dem die Elektronen an den jeweiligen Gitterplätzen $\mathbf{R}_i \equiv i$ lokalisiert sind, also dort eine hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzen. Diese Annahme macht man auch bei vielen Festkörpern in dem Sinne, dass die Festkörperelektronen örtlich gebunden sind und nur zwischen den benachbarten Orbitalen hin- und herspringen können. Daher ist es besser, als Basis lokalisierte Wellenfunktionen und keine ebenen Wellenfunktionen heranzuziehen. Man spricht dabei von der Tight-Binding-Näherung.

Mit Berücksichtigung des Spins kann der Operator $c_{i\sigma}^\dagger$, der ein Fermion an der Stelle i mit Spin σ erzeugt, auch in der Form

$$c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \phi_{i\sigma}(\mathbf{x}, \alpha) \psi_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) \quad (2.27)$$

geschrieben werden. Dabei stellt $\phi_{i\sigma}(\mathbf{x}, \alpha) = \chi_{\sigma}(\alpha) \varphi_i(\mathbf{x})$ mit $\varphi_i(\mathbf{x}) = \tilde{\varphi}(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i)$ die am Gitterplatz \mathbf{R}_i lokalisierte Einteilchenwellenfunktion dar und $\chi_{\sigma}(\alpha)$ die Einteilchen-Spinfunktion. Eine Abhängigkeit von $\varphi_i(\mathbf{x})$ von einer eventuellen Spinpolarisation im System, die ebenfalls mit σ gekennzeichnet werden könnte, wird abgesehen.

Für die Spinfunktion gelten ebenfalls die folgenden Orthonormierungs- und Vollständigkeitsrelationen:

$$\sum_{\alpha} \chi_{\sigma}^\dagger(\alpha) \chi_{\sigma'}(\alpha) = \delta_{\sigma\sigma'} \quad \sum_{\sigma} \chi_{\sigma}(\alpha) \chi_{\sigma}^\dagger(\beta) = \delta_{\alpha\beta} . \quad (2.28)$$

In der Basis der Einteilchenwellenfunktionen bzw. -spinoren $\{\phi_{i\sigma}(\mathbf{x}, \alpha)\}$ können wir den Hamilton-Operator (2.24) schreiben als

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ijkl} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{k\sigma} , \quad (2.29)$$

mit den Matrixelementen

$$\begin{aligned} t_{ij} &= \int d\mathbf{x} \varphi_i^*(\mathbf{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right) \varphi_j(\mathbf{x}) \\ U_{ijkl} &= \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_i^*(\mathbf{x}) \varphi_j^*(\mathbf{x}') U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}') \varphi_l(\mathbf{x}) . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sei ϵ_0 die Energie eines Elektrons an der Stelle i . Unter der Annahme, dass die Wellenfunktionen stark lokalisiert sind, überlappen sich die Wellenfunktionen $\varphi_i(\mathbf{x})$ von verschiedenen Gitterplätzen also nur gering. In einer guten Näherung vernachlässigt man daher jeden Überlapp bis auf den der nächsten Nachbarn. Das bedeutet, man lässt nur eine sogenannte „Nächste Nachbar-Wechselwirkung“ zu. Für den kinetischen Term, die Hopping-Amplitude

oder das Einteilchen-Matrixelement t_{ij} , können folglich die folgenden Näherungen gemacht werden:

$$t_{ij} = \begin{cases} \epsilon_0 & \text{falls } i = j \\ -t & \text{falls } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarn sind} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.31)$$

Das Wechselwirkungs-Matrixelement U_{ijkl} für die wesentliche Wechselwirkung der Elektronen, die auf verschiedenen Plätzen sitzen, lautet:

$$U_{ijkl} = U_{ij} \delta_{il} \delta_{jk} \quad (2.32)$$

mit

$$U_{ij} = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' |\varphi_i(\mathbf{x})|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} |\varphi_j(\mathbf{x}')|^2. \quad (2.33)$$

Durch die vorausgesetzte strenge Lokalisation der Elektronen wird dieser Ausdruck durch die sogenannte On-site-Wechselwirkung dominiert. Das heißt, durch die Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen im selben Orbital bzw. auf dem selben Platz. Daher kann man den Wechselwirkungsterm annähern durch

$$U_{ijkl} = \begin{cases} U & \text{falls } i = l = j = k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.34)$$

Dadurch vereinfacht sich wegen $\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}$ der Wechselwirkungsterm in (2.29) zu

$$\begin{aligned} & \frac{U}{2} \sum_{j\sigma\sigma'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{j\sigma} = -\frac{U}{2} \sum_{j\sigma\sigma'} c_{j\sigma}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} - c_{j\sigma} c_{j\sigma'}^\dagger) c_{j\sigma'} \\ & = \frac{U}{2} \left(\sum_{j\sigma\sigma'} \hat{n}_{j\sigma} \hat{n}_{j\sigma'} - \sum_{j\sigma} \hat{n}_{j\sigma} \right) = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

mit dem Einteilchendichteoperator $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ am Ort i mit Spin σ .

Offenbar kann in diesem Modell die Wechselwirkung nur zwischen zwei Elektronen stattfinden, die sich auf dem selben Platz befinden und eine entgegengesetzte Spinstellung aufweisen. So gilt nach den Antivertauschungsregeln für Fermionen (2.13) $2c_i c_i = 0$ und auch $2c_i^\dagger c_i^\dagger = 0$. Dies bedeutet, dass der Wechselwirkungsterm nur ungleich Null ist, wenn die Elektronen entgegengesetzten Spin tragen, das heißt σ und σ' haben entgegengesetzten Spin.

Der Hubbard-Hamilton-Operator kann schließlich geschrieben werden als

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \epsilon_0 \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}. \quad (2.36)$$

Im Hubbard-Modell gibt es augenscheinlich nur zwei Parameter, das Hüpf-Matrixelement t für die bindende Wechselwirkung zweier Nachbaratome und die Coulombwechselwirkung U für Elektronen am selben Atomplatz. Die Größe ϵ_0 legt den Energienullpunkt fest. In unserem Falle untersuchen wir somit zwei Plätze auf einer eindimensionalen, linearen Kette.

2 Grundlagen

3 Die Greensche Funktion

Greensche Funktionen spielen in der Theoretischen Festkörperphysik eine wichtige Rolle. Sie beschreiben die Anregungen eines Systems, wobei die Polstellen die Anregungsenergien liefern und die Amplituden die Information über die Teilchenpropagation beinhaltet. Ein Vielteilchen-System mit all seinen Wechselwirkungen kann durch ein System von Bewegungsgleichungen beschrieben werden, dessen Komplexität jedoch zu groß ist, um dieses exakt analytisch lösen zu können.

Die Bewegung des Teilchens wird dabei durch den Vielteilchen-Hamiltonian (2.22) beschrieben. Da sich die großen Systeme auch mit Hilfe einer Computerbehandlung nicht vollständig lösen lassen, ist man daher auf Näherungen und vereinfachende Modelle, wie zum Beispiel das Hubbard-Modell, angewiesen.

Dabei ist bei der Formulierung des Modells darauf zu achten, dass die wichtigsten Eigenschaften des realen Problems enthalten sind, während die untergeordneten Wechselwirkungen in der Regel vernachlässigt werden können. Um anschließend die interessierende Messgröße des Systems, zum Beispiel ein Spektrum, berechnen zu können, wird ein zugkräftiges Verfahren benötigt. Eine herausragende Stellung unter den Lösungsmethoden nehmen dabei die Greenschen Funktionen ein.

Sie ermöglichen es, aus einem komplexen Vielteilchen-System bestimmte spektrale Informationen zu gewinnen, ohne die in der Größenordnung von 10^{23} Gleichungen des Systems lösen zu müssen. So ergeben sich aus bestimmten Greenschen Funktionen unmittelbar die gewünschten bzw. zu bestimmenden Messgrößen. Dadurch wird es möglich sein, einen interessierenden physikalischen Sachverhalt im Formalismus der Greenschen Funktionen anzugeben [Elk79, Kit89, Fet03].

Die Einteilchen-Greensfunktion speziell beschreibt die Propagation eines Teilchens in einem Vielteilchensystem [Kit89]. Konkret können mit Hilfe der Greenschen Funktionen zum Beispiel Physikalische Messgrößen wie Erwartungswerte und Korrelationsfunktionen von Observablen bestimmt werden. So sind wir hierbei besonders an den Einteilchen-Anregungsenergien mit der dazugehörigen Anregungswahrscheinlichkeit interessiert.

Über die Galitskii-Migdal-Formel kann die Einteilchen-Greensfunktion aber auch zur Berechnung der Gesamtenergie benutzt werden [Bec10].

3.1 Einteilchen-Greensfunktion für Fermionen für $T = 0$

Mit Bezug auf das System betrachtet man eine vollständige Menge von Vielteilchen-Eigenzuständen $|\Psi_{N,n}\rangle$ des Hamilton-Operators $\hat{\mathcal{H}}$, wobei $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ die Zahl der Elektronen angibt und $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ den stationären N -Teilchen-Eigenzustand kennzeichnet,

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi_{N,n}\rangle = E_{N,n}|\Psi_{N,n}\rangle. \quad (3.1)$$

Die zeitgeordnete oder auch kausale Einteilchen-Greensfunktion ist definiert durch

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \frac{\langle \Psi_{N,0} | T[\psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\psi_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] | \Psi_{N,0} \rangle}{\langle \Psi_{N,0} | \Psi_{N,0} \rangle}, \quad (3.2)$$

wobei T die Zeitordnung des Operatorproduktes bewirkt,

$$T[\psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\psi_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')] = \begin{cases} \psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t)\psi_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t') & \text{für } t > t' \\ -\psi_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}'t')\psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t) & \text{für } t < t' \end{cases} \quad (3.3)$$

und $\psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t)$ den Heisenberg-Operator darstellt [Fet03]

$$\psi_{H\alpha}(\mathbf{x}t) = e^{iHt/\hbar}\psi_\alpha(\mathbf{x})e^{-iHt/\hbar}. \quad (3.4)$$

Die Größe \hbar sei hier und im folgenden stets auf Eins gesetzt.

Die kausale Greensfunktion setzt sich dementsprechend aus einem Elektronenpropagator $G_{\alpha\beta}^>(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$ und einem Lochpropagator $G_{\alpha\beta}^<(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$ zusammen, und wir können für G auch

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = \Theta(t - t')G_{\alpha\beta}^>(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') + \Theta(t' - t)G_{\alpha\beta}^<(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \quad (3.5)$$

schreiben mit der Heaviside-Sprungfunktion $\Theta(t)$. Für die Elektronenpropagation muss demnach die Zeitordnung $t > t'$ gelten, während Löcherpropagation nur für Zeiten $t' > t$ möglich ist. Das bedeutet, dass das Elektron in positiver und das Loch in negativer Zeitrichtung betrachtet wird.

Mit dem Elektronenpropagator wird ein System beschrieben, dem mittels eines inversen Photoemissionsprozesses ein Elektron zum Zeitpunkt t' am Ort \mathbf{x}' hinzugefügt wurde. $G_{\alpha\beta}^>(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$ drückt dabei die Wahrscheinlichkeit aus, dieses Elektron zum späteren Zeitpunkt t am Ort \mathbf{x} zu finden. Analog dazu kann mit $G_{\alpha\beta}^<(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t')$ die Vernichtung eines Elektrons mit Hilfe der Photoemission an der Stelle \mathbf{x} zum Zeitpunkt t und die Wiederaufindung des entstandenen Loches zum Zeitpunkt t' an der Stelle \mathbf{x} veranschaulicht werden [Bec10].

Die zeitgeordnete Greensfunktion beschreibt also für ein Vielteilchensystem im Gleichgewicht die Propagation einer Störung, die im Hinzufügen eines Teilchens und der anschließenden Entfernung desselbigen zu einem späteren Zeitpunkt besteht [Don98].

3.1 Einteilchen-Greensfunktion für Fermionen für $T = 0$

Nimmt man den Grundzustand ($n = 0$) als normiert an, $\langle \Psi_{N,0} | \Psi_{N,0} \rangle = 1$ und fügt eine vollständige Menge von Heisenberg-Zuständen ein, so können wir für (3.2) schreiben:

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') = & \sum_n [\theta(t - t') e^{-i(E_{N+1,n} - E_{N,0})(t-t')/\hbar} \langle \Psi_{N,0} | \psi_\alpha(\mathbf{x}) | \Psi_{N+1,n} \rangle \langle \Psi_{N+1,n} | \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') | \Psi_{N,0} \rangle \\ & - \theta(t' - t) e^{i(E_{N-1,n} - E_{N,0})(t-t')/\hbar} \langle \Psi_{N,0} | \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') | \Psi_{N-1,n} \rangle \langle \Psi_{N-1,n} | \psi_\alpha(\mathbf{x}) | \Psi_{N,0} \rangle] . \end{aligned} \quad (3.6)$$

Die Exponenten kann man auch mit Hilfe der positivwertigen Anregungsenergie des $(N+1)$ - bzw. $(N-1)$ -Systems

$$\omega_{N\pm 1,n} \cong (E_{N\pm 1,n} - E_{N\pm 1,0}) \quad (3.7)$$

und des chemischen Potentials

$$\mu_{N+1} \cong (E_{N+1,0} - E_{N,0}) \text{ und } \mu_{N-1} \cong (E_{N,0} - E_{N-1,0}) \quad (3.8)$$

ausdrücken [Kit89]. Das chemische Potential steht für die Änderung der Grundzustandsenergie, wenn ein Teilchen hinzugefügt oder entfernt wird. Zusammen mit den reellwertigen Spektralfunktionen

$$\begin{aligned} \rho_{\alpha\beta}^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) &= \sum_n \langle \Psi_{N,0} | \psi_\alpha(\mathbf{x}) | \Psi_{N+1,n} \rangle \langle \Psi_{N+1,n} | \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') | \Psi_{N,0} \rangle \delta(\omega - \underbrace{(\omega_{N+1,n} + \mu_{N+1})}_{\cong (E_{N+1,n} - E_{N,0})}) \\ \text{und} \\ \rho_{\alpha\beta}^-(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) &= \sum_n \langle \Psi_{N,0} | \psi_\beta^\dagger(\mathbf{x}') | \Psi_{N-1,n} \rangle \langle \Psi_{N-1,n} | \psi_\alpha(\mathbf{x}) | \Psi_{N,0} \rangle \delta(\omega - \underbrace{(\omega_{N-1,n} - \mu_{N-1})}_{\cong (E_{N-1,n} - E_{N,0})}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

kann die Zeitabhängigkeit der Greenschen Funktion wie folgt dargestellt werden:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = \begin{cases} + \int_0^\infty d\omega \rho_{\alpha\beta}^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) e^{-i\omega(t-t')}, & \text{falls } t > t' \\ - \int_0^\infty d\omega \rho_{\alpha\beta}^-(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) e^{+i\omega(t-t')}, & \text{falls } t < t' . \end{cases} \quad (3.10)$$

Mit Gleichung (3.10) wird das Verhältnis zwischen der Greenschen Funktion und der Spektralfunktion deutlich. Somit ist auch offensichtlich, dass beide Funktionen über den selben Informationsgehalt verfügen.

3 Die Greensche Funktion

Zur Darstellung der Energieabhängigkeit bildet man die Fouriertransformierte von G :

$$\begin{aligned}
iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{i\omega(t-t')} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t-t') \\
&= \lim_{\delta \rightarrow +0} \left[\int_0^{\infty} d(t-t') e^{i(\omega+i\delta)(t-t')} \int_0^{\infty} d\omega' \rho_{\alpha\beta}^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega') e^{-i\omega'(t-t')} \right. \\
&\quad \left. - \int_{-\infty}^0 d(t-t') e^{i(\omega-i\delta)(t-t')} \int_0^{\infty} d\omega' \rho_{\alpha\beta}^-(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega') e^{i\omega'(t-t')} \right]. \quad (3.11)
\end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Integrale

$$\int_0^{\infty} e^{i(\omega-\omega'+i\delta)t} dt = \frac{i}{\omega - \omega' + i\delta} \quad \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega+\omega'-i\delta)t} dt = \frac{-i}{\omega + \omega' - i\delta}, \quad \delta \rightarrow +0 \quad (3.12)$$

führt dies schließlich zur Lehmann-Darstellung der Einteilchen-Greensfunktion

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \int_0^{\infty} d\omega' \left[\frac{\rho_{\alpha\beta}^+(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega')}{\omega - \omega' + i\delta} + \frac{\rho_{\alpha\beta}^-(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega')}{\omega + \omega' - i\delta} \right], \quad (3.13)$$

oder anders ausgedrückt:

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) &= \sum_n \frac{\langle \Psi_{N,0} | \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) | \Psi_{N+1,n} \rangle \langle \Psi_{N+1,n} | \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}') | \Psi_{N,0} \rangle}{\omega - (E_{N+1,n} - E_{N,0}) + i\delta} \\
&\quad + \sum_n \frac{\langle \Psi_{N,0} | \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}') | \Psi_{N-1,n} \rangle \langle \Psi_{N-1,n} | \psi_{\alpha}(\mathbf{x}) | \Psi_{N,0} \rangle}{\omega - (E_{N,0} - E_{N-1,n}) - i\delta}. \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Wie man sieht, gibt es in der komplexen Energie-Ebene Singularitäten. Dabei handelt es sich um Pole bei den Frequenzen $\omega_n := (E_{N+1,n} - E_{N,0}) - i\delta$ und $\omega_{n'} := (E_{N,0} - E_{N-1,n}) + i\delta$. Die Pole ω_n befinden sich dabei knapp oberhalb, die Pole $\omega_{n'}$ dagegen knapp unterhalb der reellen Achse. Sie markieren die Lage der Quasiteilchen-Peaks für Elektronen und Löcher, womit man direkt die Anregungsenergien des Systems bestimmen kann.

Mit Hilfe der Site-Spin-Darstellung der Feldoperatoren (2.27) kann G auch in Form seiner Matrixelemente vereinfacht angegeben werden durch

$$\begin{aligned}
G_{i\sigma j\sigma'}(\omega) &= \langle i, \sigma | G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) | j, \sigma' \rangle \\
&= \sum_{\alpha, \beta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \varphi_i^*(\mathbf{x}) \chi_{\sigma}^{\dagger}(\alpha) G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \varphi_j(\mathbf{x}') \chi_{\sigma'}(\beta) \\
&= \sum_n \frac{\langle \Psi_{N,0} | c_{i\sigma} | \Psi_{N+1,n} \rangle \langle \Psi_{N+1,n} | c_{j\sigma'}^{\dagger} | \Psi_{N,0} \rangle}{\omega - \frac{1}{\hbar}(E_{N+1,n} - E_{N,0}) + i\delta} + \sum_n \frac{\langle \Psi_{N,0} | c_{j\sigma'}^{\dagger} | \Psi_{N-1,n} \rangle \langle \Psi_{N-1,n} | c_{i\sigma} | \Psi_{N,0} \rangle}{\omega - \frac{1}{\hbar}(E_{N,0} - E_{N-1,n}) - i\delta}. \quad (3.15)
\end{aligned}$$

3.2 Real- und Imaginärteil der Greensfunktion

Die Terme $\pm i\delta$ sind notwendig, um die Konvergenz der zeitabhängigen Integrale (3.12) zu gewährleisten. Dabei steht $+i\delta$ für die Anregung der Elektronen, während $-i\delta$ die Anregung von Löchern im Vielelektronensystem repräsentiert. Die Pole von G enthalten die Informationen über das Anregungsspektrum und damit auch über die Ionisationsenergien der Elektronen und Elektronenaffinitäten.

3.2 Real- und Imaginärteil der Greensfunktion

Oft ist man am Real- und Imaginärteil von $G_{i\sigma j\sigma'}(\omega)$ interessiert. Unter Zuhilfenahme der Dirac-Identität [Abr63]

$$\lim_{\delta \rightarrow +0} \frac{1}{\omega - \omega' \pm i\delta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega'} \right) \mp i\pi\delta(\omega - \omega') \quad (3.16)$$

können diese separat angegeben werden. \mathcal{P} steht hierbei für den Cauchyschen Hauptwert. Für den Imaginärteil ergibt sich folglich

$$\begin{aligned} \Im G_{i\sigma j\sigma'}(\omega) &= -\pi \int_0^\infty d\omega' [\rho_{i\sigma j\sigma'}^+(\omega')\delta(\omega - \omega') - \rho_{i\sigma j\sigma'}^-(\omega')\delta(\omega + \omega')] \\ &= \begin{cases} -\pi\rho_{i\sigma j\sigma'}^+(\omega), & \text{falls } \omega > 0 \\ +\pi\rho_{i\sigma j\sigma'}^-(-\omega), & \text{falls } \omega < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Ebenfalls können wir so direkt den Realteil von $G_{i\sigma j\sigma'}(\omega)$ gewinnen. So erhält man

$$\Re G_{i\sigma j\sigma'}(\omega) = \mathcal{P} \int_0^\infty d\omega' \left[\frac{\rho_{i\sigma j\sigma'}^+(\omega')}{\omega - \omega'} + \frac{\rho_{i\sigma j\sigma'}^-(\omega')}{\omega + \omega'} \right]. \quad (3.18)$$

Der Ausdruck (3.17) macht dabei die Rolle der Größen $\rho_{i\sigma j\sigma'}^\pm(\omega)$ als Matrixelemente der Spektralfunktion der Elektronen (+) bzw. Löcher (−) deutlich.

3 Die Greensche Funktion

4 Das Hubbard-Molekül

Ein exakt lösbares und damit schönes Modell zur Veranschaulichung von Elektron-Elektron-Wechselwirkungen ist das Two-Site-Hubbard-Molekül. Dieses Modell umfasst zwei Orbitale mit zwei Plätzen, die von Elektronen mit den Spineinstellungen Spin-up ($\sigma = \uparrow$) oder Spin-down ($\sigma = \downarrow$) besetzt werden können. Diese Plätze werden im folgenden mit 1 und 2 bezeichnet. In Abbildung 4.1 ist das Modell anschaulich dargestellt. Wie in (2.31) einge-

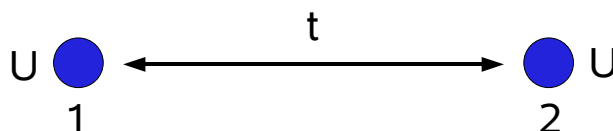


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung eines Two-Site-Hubbardmoleküls mit dem kinetischen Term t und der abstoßenden Wechselwirkung U .

führt, beschreibt t die effektive Wechselwirkung von Elektronen, die an beiden Rumpfen mit den Plätzen $i = 1$ und 2 lokalisiert sind. Sofern die zwei zu betrachtenden Elektronen entgegengesetzte Spinstellungen am Platz i haben, können sie sich über die Wechselwirkung U abstoßen. Wir nehmen hier und im Folgenden stets $t > 0$ und $U > 0$ an. Besitzen die beiden Elektronen die gleiche Spinstellung, so ist aufgrund des Pauli-Prinzips für ein Elektron ein Platz nicht einnehmbar, wodurch ein Hüpfen zwischen beiden Plätzen nicht möglich ist.

Für $N = 2$ Elektronen kann das Modell als eine Beschreibungsmöglichkeit eines Wasserstoffmoleküls angesehen werden, bei $N = 1$ und $N = 3$ Elektronen können wir dementsprechend das Modell zur Interpretation der Ionen H_2^+ und H_2^- gebrauchen.

Der Vorteil dieses Modell besteht darin, dass es exakt analytisch lösbar ist. Interessant dabei ist auch ein Vergleich mit Näherungsmethoden, etwa der G_0W_0 -Approximation oder der Hartree-Fock-Näherung.

Zunächst jedoch wenden wir uns der Betrachtung des Hubbard-Moleküls zu, wobei die Anzahl der Elektronen N von 1 bis 3 variiert. Der Hamilton-Operator (siehe (2.36)) des zu betrachtenden Elektronensystems lautet (vgl. [Rom09])

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\sigma} \left[c_{1\sigma}^{\dagger} c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} \right] + U \sum_{i=1,2} \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\uparrow} + \epsilon_0 \sum_{\sigma, i=1,2} \hat{n}_{i\sigma}. \quad (4.1)$$

4 Das Hubbard-Molekül

Der Hamiltonian (4.1) enthält den Gesamtteilchenzahloperator $\sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$. Er wird deshalb in der Besetzungszahldarstellung automatisch blockdiagonal. Im Falle $N = 2$ kommutiert $\hat{\mathcal{H}}$ auch mit dem Gesamtspinoperator $\hat{\mathbf{S}}$, was eine Einteilung der möglichen Eigenzustände in Singulett-Zustände ($S = 0$) und Triplett-Zustände ($S = 1$) möglich macht.

Im folgenden sind die Diskussionen für die unterschiedlichen Elektronenzahlen von $N = 1$ bis $N = 3$ aufgeführt.

4.1 Hubbard-Molekül mit einem Elektron ($N = 1$)

Das einzelne Elektron hat zwei Plätze zur Verfügung, darüber hinaus zwei Einstellmöglichkeiten für den Spin. Damit ergeben sich als Fockzustände

$$|n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}\rangle \quad (4.2)$$

im Falle eines einzelnen Elektrons vier mögliche Einteilchenzustände mit den Besetzungszahlen $n_{i\sigma} = 0$ oder 1 .

Diese vier Einteilchen-Basiszustände des Hilbert-Raums für $N = 1$, $\mathcal{H}_a^{(1)}$ werden durch die Wirkung des entsprechenden Erzeugungsoperators auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ erzeugt und können mit Bezug auf die Notation (4.2) auf eine andere Art dargestellt werden:

$$\begin{aligned} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, 0\rangle = |10, 00\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, 0\rangle = |01, 00\rangle \\ c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \uparrow\rangle = |00, 10\rangle & c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \downarrow\rangle = |00, 01\rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Um die Eigenwerte des Hamiltonoperators (4.1) zu bestimmen, geht man sinnvollerweise zur Matrixdarstellung über. Wendet man nun $\hat{\mathcal{H}}$ auf die vier Basiszustände an und betrachtet seine Wirkung auf die einzelnen Terme, so kommt man mit Hilfe der Relationen (2.11) und (2.15) zu folgendem Ergebnis (die dazugehörigen Rechenschritte sind im Anhang A.1 ab Seite 71 aufgelistet):

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|\uparrow, 0\rangle = \epsilon_0|\uparrow, 0\rangle - t|0, \uparrow\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|\downarrow, 0\rangle = \epsilon_0|\downarrow, 0\rangle - t|0, \downarrow\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|0, \uparrow\rangle = \epsilon_0|0, \uparrow\rangle - t|\uparrow, 0\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|0, \downarrow\rangle = \epsilon_0|0, \downarrow\rangle - t|\downarrow, 0\rangle. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Der Hamiltonoperator in der Matrixdarstellung bezüglich der Basiszustände (4.3) ist also nicht-diagonal und lautet somit:

$$\hat{\mathcal{H}}^{N=1} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 & -t & 0 \\ 0 & \epsilon_0 & 0 & -t \\ -t & 0 & \epsilon_0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

4.2 Hubbard-Molekül mit zwei Elektronen ($N = 2$)

in Übereinstimmung mit [Rom09]. Da nur ein Elektron vorhanden ist, kann keine Wechselwirkung $\propto U$ auftreten. Nun können mit Hilfe der charakteristischen Gleichung

$$\det(\hat{\mathcal{H}} - \lambda \mathcal{E}) = 0 \quad (4.6)$$

die Eigenwerte λ und die Eigenvektoren $|\Psi_{1,n}\rangle$ gebildet werden. Das charakteristische Polynom $p^{N=1}(\lambda)$ in λ lautet

$$p^{N=1}(\lambda) = (\epsilon_0 - \lambda) \cdot [(\epsilon_0 - \lambda)^3 - (\epsilon_0 - \lambda) \cdot t^2] - t \cdot [(\epsilon_0 - \lambda)^2 \cdot t - t^3] = 0. \quad (4.7)$$

Daraus ergeben sich (in Übereinstimmung mit [Rom09], [Tom07]) die folgenden Eigenwerte und Eigenvektoren für $N = 1$:

$$\begin{aligned} E_{1,0} &= \epsilon_0 - t & |\Psi_{1,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0\rangle + |0, \uparrow\rangle) \\ E_{1,1} &= \epsilon_0 - t & |\Psi_{1,1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow\rangle) \\ E_{1,2} &= \epsilon_0 + t & |\Psi_{1,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0\rangle - |0, \uparrow\rangle) \\ E_{1,3} &= \epsilon_0 + t & |\Psi_{1,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, 0\rangle - |0, \downarrow\rangle). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Eigenwerte sind offensichtlich zweifach entartet. Dabei beschreiben die Zustände $|\Psi_{1,0}\rangle$ und $|\Psi_{1,1}\rangle$ den entarteten Grundzustand. Später werden wir jedoch indirekt einen Symmetriebruch einführen und den Grundzustand nur mit einem Spin-up-Elektron besetzt betrachten.

Das Ergebnis (4.8) liefert uns somit die Energien der bindenden und antibindenden Zustände. Dabei repräsentiert $E_b^{N=1} \equiv E_{1,0} = E_{1,1}$ die bindenden und $E_{ab}^{N=1} \equiv E_{1,2} = E_{1,3}$ die antibindenden Zustände, die mit einem Elektron besetzt werden können. Wie man sehen kann, gibt es eine Energielücke zwischen dem bindenden und antibindenden Zustand von $E_g^{N=1} := E_{ab}^{N=1} - E_b^{N=1} = 2t$. Die $N = 1$ -Zustände sind in Abbildung 4.2 illustriert.

4.2 Hubbard-Molekül mit zwei Elektronen ($N = 2$)

Erneut beziehen wir uns auf den oben dargestellten Hamiltonoperator (4.1). Bei zwei Elektronen ergeben sich unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips sechs mögliche Basiszustände. Diese sind

$$\begin{aligned} c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \downarrow\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \uparrow\rangle & c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \uparrow\rangle \\ c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \downarrow\rangle & c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, 0\rangle & c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \uparrow\downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Die Kombinationen $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$, $|\uparrow\downarrow, 0\rangle$ und $|0, \uparrow\downarrow\rangle$ sind Eigenzustände des Gesamtspins zum Eigenwert $S = 0$, während die Kombinationen $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle)$, $|\uparrow, \uparrow\rangle$ und $|\downarrow, \downarrow\rangle$ die zum Eigenwert $S = 1$ gehörenden Eigenzustände sind.

4 Das Hubbard-Molekül

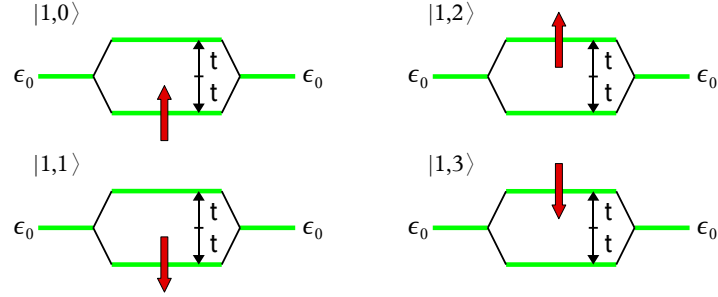


Abbildung 4.2: Hubbard-Molekül: Illustration der Eigenzustände des Gesamtsystems durch Besetzung der Einteilchenniveaus im Falle $N = 1$.

Auf diese sechs Zweiteilchenzustände wendet man nun wieder $\hat{\mathcal{H}}$ an und erhält so schließlich die Matrixelemente des Hamiltonians (Die Berechnung erfolgt analog zu der im Falle $N = 1$ und ist im Anhang A.2 ab Seite 72 zu finden).

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow, \downarrow\rangle &= 2\epsilon_0|\uparrow, \downarrow\rangle - t|\uparrow\downarrow, 0\rangle - t|0, \uparrow\downarrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\downarrow, \uparrow\rangle &= 2\epsilon_0|\downarrow, \uparrow\rangle + t|\uparrow\downarrow, 0\rangle + t|0, \uparrow\downarrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow, \uparrow\rangle &= 2\epsilon_0|\uparrow, \uparrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\downarrow, \downarrow\rangle &= 2\epsilon_0|\downarrow, \downarrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow\downarrow, 0\rangle &= (2\epsilon_0 + U)|\uparrow\downarrow, 0\rangle - t|\uparrow, \downarrow\rangle + t|\downarrow, \uparrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|0, \uparrow\downarrow\rangle &= (2\epsilon_0 + U)|0, \uparrow\downarrow\rangle - t|\uparrow, \downarrow\rangle + t|\downarrow, \uparrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Daraus ergibt sich unmittelbar die gewünschte Matrixdarstellung von $\hat{\mathcal{H}}^{N=2}$ (in Analogie mit [Rom09])

$$\hat{\mathcal{H}}^{N=2} = \begin{pmatrix} 2\epsilon_0 & 0 & 0 & 0 & -t & -t \\ 0 & 2\epsilon_0 & 0 & 0 & +t & +t \\ 0 & 0 & 2\epsilon_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_0 & 0 & 0 \\ -t & +t & 0 & 0 & 2\epsilon_0 + U & 0 \\ -t & +t & 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_0 + U \end{pmatrix}, \tag{4.11}$$

mit dem resultierenden charakteristische Polynom

$$\begin{aligned}
 p^{N=2}(\lambda) &= (2\epsilon_0 - \lambda) \cdot [(2\epsilon_0 - \lambda)^3 \cdot (U - \lambda + 2\epsilon_0)^2 - 2(2\epsilon_0 - \lambda)^2 \cdot t^2 \cdot (U - \lambda + 2\epsilon_0)] \\
 &\quad - 2 \cdot (2\epsilon_0 - \lambda)^3 \cdot t^2 \cdot (U - \lambda + 2\epsilon_0) = 0.
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Als Eigenwerte und Eigenvektoren erhalten wir in Übereinkunft mit [Rom09, Tom07]

4.2 Hubbard-Molekül mit zwei Elektronen ($N = 2$)

schließlich (siehe Anhang A.3, Seite 72 f.)

$$\begin{aligned}
 E_{2,0} &= 2\epsilon_0 - \frac{1}{2}(c - U) & |\Psi_{2,0}\rangle &= \frac{4t}{a(c - U)} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) + \frac{1}{a} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,1} &= 2\epsilon_0 + \frac{1}{2}(c + U) & |\Psi_{2,1}\rangle &= \frac{4t}{b(c + U)} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) - \frac{1}{b} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,2} &= 2\epsilon_0 + U & |\Psi_{2,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,3} &= 2\epsilon_0 & |\Psi_{2,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle) \\
 E_{2,4} &= 2\epsilon_0 & |\Psi_{2,4}\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle \\
 E_{2,5} &= 2\epsilon_0 & |\Psi_{2,5}\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle .
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Die neu eingeführten Größen sind

$$c = \sqrt{16t^2 + U^2} \quad a = \sqrt{2 \left(\frac{16t^2}{(c-U)^2} + 1 \right)} \quad \text{und} \quad b = \sqrt{2 \left(\frac{16t^2}{(c+U)^2} + 1 \right)} . \tag{4.14}$$

Dabei gelten für die Vorfaktoren der Eigenvektoren die Beziehungen $\frac{4t}{a(c-U)} = \frac{1}{b}$ und $\frac{4t}{b(c+U)} = \frac{1}{a}$.

Es sei hierbei erwähnt, dass es sich bei $E_{2,3} = E_{2,4} = E_{2,5}$ um einen dreifach entarteten Eigenwert der Tripletzustände handelt. Wechselwirkungen spielen dort keine Rolle. Der Zustand $|\Psi_{2,0}\rangle$ stellt den Grundzustand für $N = 2$ dar.

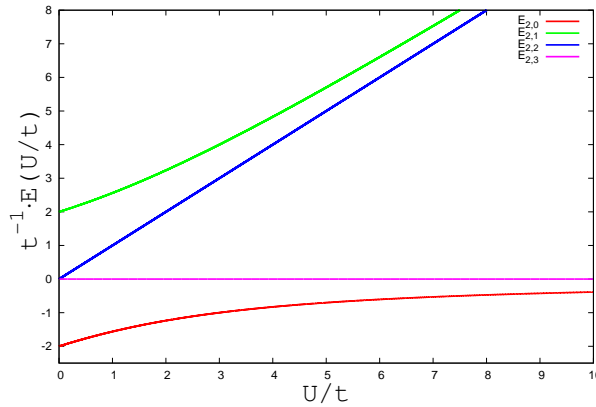


Abbildung 4.3: Gesamt-Energieeigenwerte für $N = 2$ in Abhängigkeit der Wechselwirkung $\frac{U}{t}$. Der Wert $2\epsilon_0$ wurde als Energienullpunkt gewählt.

In den beiden Grenzfällen $U = 0$ und $t = 0$ erhalten wir für die beiden Eigenvektoren $|\Psi_{2,0}\rangle$

4 Das Hubbard-Molekül

und $|\Psi_{2,1}\rangle$:

$$\begin{aligned} |\Psi_{2,0}\rangle_{U=0} &= \frac{1}{2} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle) & |\Psi_{2,0}\rangle_{t=0} &= +\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) \\ |\Psi_{2,1}\rangle_{U=0} &= \frac{1}{2} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow\rangle) & |\Psi_{2,1}\rangle_{t=0} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle) . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Die anderen Eigenzustände bleiben unverändert. Im atomaren Limes $U \gg t$ gilt offenbar $\lim_{t \rightarrow \infty} E_{2,0} = E_{2,3} = 2\epsilon_0$ und $\lim_{t \rightarrow \infty} E_{2,1} = E_{2,2} = 2\epsilon_0 + U$. Im wechselwirkungsfreien Fall $U \rightarrow 0$ finden wir dagegen $\lim_{U \rightarrow 0} E_{2,0} = 2\epsilon_0 - 2t$, $\lim_{U \rightarrow 0} E_{2,1} = 2\epsilon_0 + 2t$ und $\lim_{U \rightarrow 0} E_{2,2} = E_{2,3} = 2\epsilon_0$.

Die ersten drei Zustände $|\Psi_{2,0}\rangle, |\Psi_{2,1}\rangle, |\Psi_{2,2}\rangle$ sind nicht entartete Singulett-Zustände mit $S = 0$, während die drei anderen Zustände $|\Psi_{2,3}\rangle, |\Psi_{2,4}\rangle, |\Psi_{2,5}\rangle$ wie oben erwähnt Triplet-Zustände mit $S = 1$ sind. Dabei stellt $|\Psi_{2,0}\rangle$ den Zustand mit der niedrigsten und $|\Psi_{2,1}\rangle$ den Zustand mit der höchsten Energie dar. Zur besseren Veranschaulichung sind in Abbildung 4.3 die Eigenenergien $E_2(\frac{U}{t})$ als Funktion der Wechselwirkung $\frac{U}{t}$ aufgetragen. Wie man unschwer erkennen kann, bleiben die Triplet-Zustände für alle U und t konstant. Bei den Singulett-Zuständen gibt es im Falle einer starken Wechselwirkung U und einer verschwindenden Molekülbindung t eine energetische Verschiebung zwischen $|\Psi_{2,1}\rangle$ bzw. $|\Psi_{2,2}\rangle$ und $|\Psi_{2,0}\rangle$ um U .

In Abbildung 4.4 sind die Eigenzustände des Hubbard-Moleküls mit ihrer Besetzung illustriert, wobei zu beachten ist, dass dieses Schema nur im Limes $U/t \ll 1$ gültig ist.

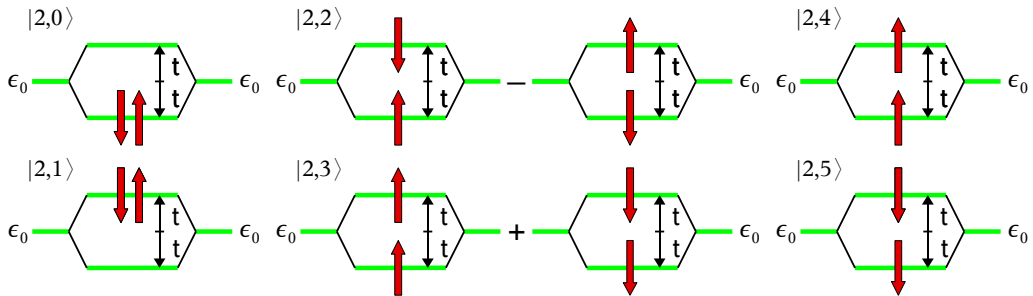


Abbildung 4.4: Hubbard-Molekül: Illustration der Eigenzustände des Gesamtsystems durch Besetzung der Einteilchenniveaus im Falle $N = 2$.

Aus den Amplituden der Eigenvektoren $|\Psi_{N,n}\rangle$ kann man direkt die Wahrscheinlichkeiten für Einfachbesetzung $P_{N,n}(e)$ und Doppelbesetzung $P_{N,n}(d)$ der beiden Plätze 1 und 2 ableiten (siehe Abbildung 4.5). Für den Grundzustand $|\Psi_{2,0}\rangle$ finden wir $P_{2,0}(d) = \frac{2}{a^2}$ und $P_{2,0}(e) = 2 \cdot \left(\frac{4t}{a(c-U)} \right)^2$ (vgl. [Tom07]). Damit wird deutlich, dass im Falle $U = 0$ Doppel- und

4.3 Hubbard-Molekül mit drei Elektronen ($N = 3$)

Einfachbesetzung gleich wahrscheinlich sind, das heißt $P_{2,0}(d)_{U=0} = P_{2,0}(e)_{U=0} = \frac{1}{2}$, während im atomaren Limes $t \rightarrow 0$ keine Doppelbesetzung mehr möglich ist und beide Elektronen auf jeden Fall unterschiedliche Plätze einnehmen müssen: $P_{2,0}(d)_{t=0} = 0$, $P_{2,0}(e)_{t=0} = 1$.

Beim angeregten Zustand mit der höchsten Energie $|\Psi_{2,1}\rangle$ sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten anders verteilt. Da die Relationen $P_{2,0}(d) = P_{2,1}(e)$ und $P_{2,0}(e) = P_{2,1}(d)$ gültig sind, findet man mit $P_{2,1}(d) = \frac{2}{b^2}$ und $P_{2,1}(e) = 2 \cdot \left(\frac{4t}{b(c+U)}\right)^2$ für $U = 0$ offensichtlich $P_{2,1}(d)_{U=0} = P_{2,1}(e)_{U=0} = \frac{1}{2}$, jedoch wird mit zunehmender Wechselwirkung U die Wahrscheinlichkeit einer Doppelbesetzung steigen, so dass wir im Grenzfall $t \rightarrow 0$ die Wahrscheinlichkeiten $P_{2,1}(d)_{t=0} = 1$, $P_{2,1}(e)_{t=0} = 0$ finden.

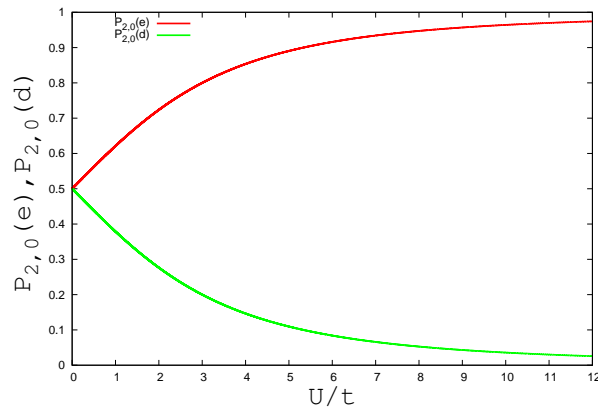


Abbildung 4.5: Besetzungswahrscheinlichkeiten $P_{N,n}(e)$ und $P_{N,n}(d)$ als Funktion von $\frac{U}{t}$.

4.3 Hubbard-Molekül mit drei Elektronen ($N = 3$)

Betrachtet man nun den Fall mit $N = 3$ Elektronen, haben wir wie bei $N = 1$ eine Basis, die aus vier Basisvektoren besteht. Die entsprechenden Vektoren lauten:

$$\begin{aligned}
 c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \\
 c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle & c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Um wiederum die Matrixschreibweise von $\hat{\mathcal{H}}$ bezüglich dieser Basiszustände zu erhalten, wenden wir $\hat{\mathcal{H}}$ auf (4.16) an und kommen zu folgendem Ergebnis (siehe Anhang A.4 auf Seite 73):

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle &= (3\epsilon_0 + U)|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + t|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle &= (3\epsilon_0 + U)|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + t|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle &= +t|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + (3\epsilon_0 + U)|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\
 \hat{\mathcal{H}}|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle &= +t|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + (3\epsilon_0 + U)|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

4 Das Hubbard-Molekül

Für die Matrixdarstellung ergibt sich also

$$\hat{\mathcal{H}}^{N=3} = \begin{pmatrix} 3\epsilon_0 + U & 0 & +t & 0 \\ 0 & 3\epsilon_0 + U & 0 & +t \\ +t & 0 & 3\epsilon_0 + U & 0 \\ 0 & +t & 0 & 3\epsilon_0 + U \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Die Eigenwerte und Eigenvektoren aus (4.18) können, wie in den anderen beiden vorangegangenen Fällen beschrieben, aus dem charakteristischen Polynom hergeleitet werden:

$$p^{N=3}(\lambda) = (U - \lambda + 3\epsilon_0) \cdot [(U - \lambda + 3\epsilon_0)^3 - t^2 \cdot (U - \lambda + 3\epsilon_0)] + t \cdot [t^3 - t \cdot (U - \lambda + 3\epsilon_0)^2] = 0. \quad (4.19)$$

Die sich daraus ergebenden Eigenwerte und -vektoren sind

$$\begin{aligned} E_{3,0} &= U - t + 3\epsilon_0 & |\Psi_{3,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \\ E_{3,1} &= U - t + 3\epsilon_0 & |\Psi_{3,1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle) \\ E_{3,2} &= U + t + 3\epsilon_0 & |\Psi_{3,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \\ E_{3,3} &= U + t + 3\epsilon_0 & |\Psi_{3,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (4.20)$$

mit $|\Psi_{3,0}\rangle$ und $|\Psi_{3,1}\rangle$ als dem entarteten Grundzustand. In (4.20) erscheinen nun die mit einem Minuszeichen versehenen Zustände als die niedrigsten Eigenzustände auf. Dies ist auf die bereits angesprochene Elektron-Loch-Symmetrie zurückzuführen. Genau wie bei $N = 1$ erhalten wir eine Energielücke von $E_g^{N=3} := E_{3,2} - E_{3,0} = 2t$. Die Zustände sind in Abbildung (4.6) illustriert.

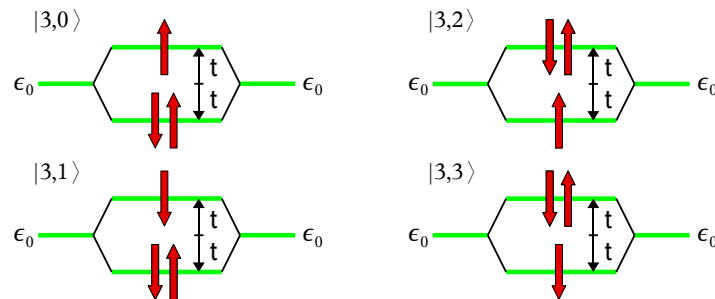


Abbildung 4.6: Hubbard-Molekül: Illustration der Eigenzustände des Gesamtsystems durch Besetzung der Einteilchenniveaus im Falle $N = 3$.

4.4 Hubbard-Molekül mit null und vier Elektronen ($N = 0$ und $N = 4$)

Schließlich seien noch die beiden trivialen Fälle mit $N = 0$ und $N = 4$ Elektronen erwähnt. Bei null Elektronen gibt es nur den Vakuumzustand

$$|\Psi_{0,0}\rangle = |0\rangle \equiv |00, 00\rangle . \quad (4.21)$$

Mit diesem einzigen Basiszustand kommt man direkt zur trivialen Eigenwertgleichung

$$\hat{\mathcal{H}}|0\rangle = 0|0\rangle . \quad (4.22)$$

Der Eigenwert ist folglich $E_{0,0} = 0$.

Auch beim Fall mit vier Elektronen gibt es offensichtlich nur eine Möglichkeit, wie sich die Elektronen an den beiden Plätzen anordnen können, nämlich

$$c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \equiv |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \equiv |11, 11\rangle \equiv |\Psi_{4,0}\rangle . \quad (4.23)$$

Somit besteht die Basis nur aus diesem Vektor, der dann zugleich Eigenvektor zur Eigenwertgleichung

$$\hat{\mathcal{H}}|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle = (2U + 4\epsilon_0)|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \quad (4.24)$$

mit dem Eigenwert $E_{4,0} = 2U + 4\epsilon_0$ ist.

Im Bezug auf die Zustände $|\Psi_{0,0}\rangle$ und $|\Psi_{4,0}\rangle$ sind die Zustände für $N = 1$ und $N = 3$ symmetrisch im Sinne der Vertauschung von Elektronen und Löchern.

4 *Das Hubbard-Molekül*

5 Die Greensche Funktion und Spektralfunktion

In diesem Kapitel wenden wir uns der Ermittlung der Greenschen Funktionen und den daraus ableitbaren Spektralfunktionen zu. Wir untersuchen das Verhalten eines N -Elektronensystems, dem ein Elektron oder Loch mit einer bestimmten Spinquantenzahl σ hinzugefügt oder entfernt wird. Interessant dabei sind insbesondere auch die Symmetrieeigenschaften dieser Funktionen. Zu deren Berechnung benötigen wir die bereits ermittelten Eigenwerte und Eigenvektoren aus Kapitel 4.

In allen Zuständen bleibt der Gesamtspin $S = 0, \frac{1}{2}, 1$ und $S = \frac{3}{2}$ erhalten. Da auch keine Übergänge zwischen den Singulett- und den Triplett-Zuständen erlaubt sind, bleibt der Einteilchen-Spin ebenfalls erhalten. Alle Greenschen Funktionen werden diagonal in den Spin-Quantenzahlen ($\sigma = \sigma'$), so dass die Matrix der Greenschen Funktion $\mathbf{G}(\omega)$ block-diagonal ist.

Für die Atomplätze gilt stets $i, j \in \{1, 2\}$, wobei aus dem Zusammenhang immer klar sein wird, ob es sich um einen Site-Index oder die imaginäre Einheit i handelt.

Bei entgegengesetzten Spineinstellungen ($\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ oder $\sigma, \sigma' = \downarrow, \uparrow$) verschwinden also die Greenschen Funktionen in allen Fällen $N \in \{1, 2, 3\}$:

$$G_{i\uparrow j\downarrow}^{N=1,2,3}(\omega) = G_{i\downarrow j\uparrow}^{N=1,2,3}(\omega) = 0. \quad (5.1)$$

Dies ist auch zu erwarten, da in diesem Modell keine Kopplung zwischen Spin-up und Spin-down Elektronen existiert und demnach keine Spin-Umklappprozesse möglich. Wir bestätigen damit im Detail die obigen allgemeinen Überlegungen.

Die zur Bestimmung der Greenschen Funktion $G_{i\sigma j\sigma'}(\omega)$ benötigten Eigenfunktionen $|\Psi_{N,n}\rangle$ haben wir im vorangegangenen Kapitel für alle Elektronenzahlen $N \in \{0, \dots, 4\}$ bestimmt. Nachfolgend sind die Greensfunktionen für $N = 1$ bis $N = 3$ aufgeführt, wobei im folgenden zur besseren Darstellung $\hbar = 1$ gesetzt wurde. (Berechnungen von Matrixelementen für $G_{i\sigma j\sigma'}(\omega)$ befinden sich im Anhang B, ab Seite 75).

Zur übersichtlicheren Darstellung werden im verbleibenden Text die Greenschen Funktionen mit gleicher Spineinstellung ($\sigma = \sigma'$) mit $G_{i\sigma j\sigma}(\omega) \equiv G_{ij\sigma}(\omega)$ abgekürzt.

Da alle Matrixelemente reellwertig sind, kann für $|i, \sigma\rangle = |j, \sigma'\rangle$ ausgenutzt werden, dass für zwei beliebige Wellenfunktionen $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ die Relation

$$\langle \phi | c_{i\sigma} | \psi \rangle = \langle \psi | c_{i\sigma}^\dagger | \phi \rangle^* = \langle \psi | c_{i\sigma}^\dagger | \phi \rangle \quad (5.2)$$

5 Die Greensche Funktion und Spektralfunktion

gilt. Daraus ergibt sich unmittelbar die folgende Vereinfachung:

$$\begin{aligned}\langle\phi|c_{i\sigma}|\psi\rangle\langle\psi|c_{i\sigma}^\dagger|\phi\rangle &= \langle\psi|c_{i\sigma}^\dagger|\phi\rangle\langle\psi|c_{i\sigma}^\dagger|\phi\rangle = |\langle\psi|c_{i\sigma}^\dagger|\phi\rangle|^2 \\ \langle\phi|c_{i\sigma}^\dagger|\psi\rangle\langle\psi|c_{i\sigma}|\phi\rangle &= \langle\psi|c_{i\sigma}|\phi\rangle\langle\psi|c_{i\sigma}|\phi\rangle = |\langle\psi|c_{i\sigma}|\phi\rangle|^2.\end{aligned}\quad (5.3)$$

Die Spezialfälle $G_{ij\sigma}(\omega)_{t\rightarrow 0}$ und $G_{ij\sigma}(\omega)_{U\rightarrow 0}$ sind im Anhang D.3 auf Seite 83 dargestellt.

5.1 Die Greenschen Funktionen für $N = 1$

Als Grundzustand $|\Psi_{1,0}\rangle$ haben wir ein Spin-up-Elektron gewählt. Gemäß der Definition (3.15) können wir nun die Greensche Funktion $G_{ij\sigma}^{N=1}(\omega)$ wie folgt formulieren

$$G_{ij\sigma}^{N=1}(\omega) = \sum_n \left[\frac{\langle\Psi_{1,0}|c_{i\sigma}|\Psi_{2,n}\rangle\langle\Psi_{2,n}|c_{j\sigma}^\dagger|\Psi_{1,0}\rangle}{\omega - (E_{2,n} - E_{1,0}) + i\delta} \right] + \frac{\langle\Psi_{1,0}|c_{j\sigma}^\dagger|\Psi_{0,0}\rangle\langle\Psi_{0,0}|c_{i\sigma}|\Psi_{1,0}\rangle}{\omega - (E_{1,0} - E_{0,0}) - i\delta}. \quad (5.4)$$

Die Berechnung der Matrixelemente (siehe Anhang B.1, Seite 75 f.) führt uns zu dem folgenden Ergebnis:

$$G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right]. \quad (5.5)$$

Hier ist sofort erkennbar, dass die Elektronen- und die Lochanregungsenergie und damit die Energielücke $E_g^{N=1} = 2t$ unabhängig von U ist. Bei der entgegengesetzten Spinstellung ($\sigma = \downarrow$) finden wir dagegen

$$\begin{aligned}G_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{\frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 + t - \frac{1}{2}(c-U)) + i\delta} + \frac{\frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{1}{2}(c+U)) + i\delta} \\ &+ \frac{(-1)^{(i-j)}}{4} \left[\frac{1}{\omega - (U + \epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} \right],\end{aligned}\quad (5.6)$$

mit den Größen a, b und c , wie in (4.14) definiert. Offenbar können sich nun die Elektronen am selben Platz begegnen und über die Wechselwirkungsstärke U miteinander interagieren. Dies hat zur Folge, dass mehrere gewichtete Anregungspeaks im Spektrum erscheinen werden (siehe Kapitel 5.5). Die Resultate stimmen überein mit [Rom09]. Aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Plätze 1 und 2 gilt erwartungsgemäß:

$$\begin{aligned}G_{11\uparrow}^{N=1}(\omega) &= G_{22\uparrow}^{N=1}(\omega) & G_{12\uparrow}^{N=1}(\omega) &= G_{21\uparrow}^{N=1}(\omega) \\ G_{11\downarrow}^{N=1}(\omega) &= G_{22\downarrow}^{N=1}(\omega) & G_{12\downarrow}^{N=1}(\omega) &= G_{21\downarrow}^{N=1}(\omega).\end{aligned}\quad (5.7)$$

Zudem ist die Greensche Funktion bei geeignet gewähltem Energienullpunkt ϵ_0 symmetrisch bzw. antisymmetrisch in ω :

$$\begin{aligned}G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot G_{ij\uparrow}^{N=1}(-\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = 0 \\ G_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot G_{ij\uparrow}^{N=3}(-\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -\frac{U}{2}.\end{aligned}\quad (5.8)$$

In (5.8) offenbart sich wiederum die bereits angesprochene Elektron-Loch-Symmetrie.

5.2 Die Greenschen Funktionen für $N = 2$

Ausgehend von der Formel

$$G_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_{2,0} | c_{i\sigma} | \Psi_{3,n} \rangle \langle \Psi_{3,n} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle}{\omega - (E_{3,n} - E_{2,0}) + i\delta} \right] + \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_{2,0} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{1,n} \rangle \langle \Psi_{1,n} | c_{i\sigma} | \Psi_{2,0} \rangle}{\omega - (E_{2,0} - E_{1,n}) - i\delta} \right] \quad (5.9)$$

gelangt man zu dem Ergebnis (siehe Anhang B.2, Seite 76):

$$\begin{aligned} G_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = & \frac{(-1)^{(i-j)} \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{1}{2}(c+U)) + i\delta} + \frac{\frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{1}{2}(c+U)) + i\delta} \\ & + \frac{\frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 + t - \frac{1}{2}(c-U)) - i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)} \frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 - t - \frac{1}{2}(c-U)) - i\delta}, \end{aligned} \quad (5.10)$$

in voller Übereinstimmung mit [Rom09]. Da für $N = 2$ die folgenden Symmetrierelationen

$$\begin{aligned} G_{11\uparrow}^{N=2}(\omega) &= G_{22\uparrow}^{N=2}(\omega) = G_{11\downarrow}^{N=2}(\omega) = G_{22\downarrow}^{N=2}(\omega) \\ G_{12\uparrow}^{N=2}(\omega) &= G_{21\uparrow}^{N=2}(\omega) = G_{12\downarrow}^{N=2}(\omega) = G_{21\downarrow}^{N=2}(\omega) \end{aligned} \quad (5.11)$$

gültig sind, führen beide Spinstellungen natürlich zur selben Greenschen Funktion. Die Symmetrie und Antisymmetrie in ω wird durch $\epsilon_0 = -\frac{U}{2}$ gewährleistet:

$$G_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = (-1)^{(i-j+1)} \cdot G_{ij\sigma}^{N=2}(-\omega) \quad \text{für} \quad \epsilon_0 = -\frac{U}{2}. \quad (5.12)$$

Die Pole der Greenschen Einteilchenfunktion (5.10) ergeben unabhängig von der Spinstellung die Anregungsenergien für Elektronen und Löcher, $E_{e/l} = \epsilon_0 \pm (-t + \frac{c}{2}) + \frac{U}{2}$ und deren Satellitenstrukturen $E_{es/l_s} = \epsilon_0 \pm (t + \frac{c}{2}) + \frac{U}{2}$ (vgl. [Rom09, Tom07]). Aus der Differenz dieser Elektronen- und Loch-Anregungsenergien finden wir schließlich die Quasiteilchenenergielücke des neutralen Moleküls mit $N = 2$:

$$E_g^{N=2} = 2(-t + \frac{c}{2}) = -2t + \sqrt{16t^2 + U^2}, \quad (5.13)$$

das den energetischen Abstand zwischen dem bindenden und antibindenden Niveau angibt, vergrößert um den Anregungs- oder Quasiteilcheneffekt. Wie man leicht erkennen kann, ist die Aufspaltung im wechselwirkungsfreien Fall mit $E_{g,U=0}^{N=2} = 2t$ am kleinsten und wächst kontinuierlich mit wachsendem U . Im anderen Grenzfall, dem atomaren Limes, ergibt sich ein Energiegap von $E_{g,t=0}^{N=2} = U$, womit wir eine typische Aufspaltung zweier Hubbard-Bänder vorliegen haben. Interessant dabei ist, dass die Satellitenstrukturen der Elektronen- und Löcher-Peaks genau um das Bindend/Antibindend-Gap von $E_{g,U=0}^{N=2} = 2t$ zu höheren oder tieferen Energien hin verschoben sind.

5.3 Die Greenschen Funktionen für $N = 3$

Für $N = 3$ lautet die zugrunde liegende Formel

$$G_{ij\sigma}^{N=3}(\omega) = \frac{\langle \Psi_{3,0} | c_{i\sigma} | \Psi_{4,0} \rangle \langle \Psi_{4,0} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{3,0} \rangle}{\omega - (E_{4,0} - E_{3,0}) + i\delta} + \sum_n \left[\frac{\langle \Psi_{3,0} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{2,n} \rangle \langle \Psi_{2,n} | c_{i\sigma} | \Psi_{3,0} \rangle}{\omega - (E_{3,0} - E_{2,n}) - i\delta} \right]. \quad (5.14)$$

Dies führt uns zu den folgenden Greensfunktionen (siehe Anhang B.3, Seite 77):

$$\begin{aligned} G_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{(-1)^{(i-j)} \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{1}{2}(c+U)) - i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)} \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right)^2}{\omega - (\epsilon_0 - t - \frac{1}{2}(c-U)) - i\delta} \\ &\quad + \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + U) - i\delta} \right] \\ G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t + U) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + U) - i\delta} \right], \end{aligned} \quad (5.15)$$

mit den entsprechenden Symmetrierelationen wie im Fall $N = 1$

$$\begin{aligned} G_{11\uparrow}^{N=3}(\omega) &= G_{22\uparrow}^{N=3}(\omega) & G_{12\uparrow}^{N=3}(\omega) &= G_{21\uparrow}^{N=3}(\omega) \\ G_{11\downarrow}^{N=3}(\omega) &= G_{22\downarrow}^{N=3}(\omega) & G_{12\downarrow}^{N=3}(\omega) &= G_{21\downarrow}^{N=3}(\omega). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Bei der Spin-up-Funktion in (5.15) werden ausschließlich Lochanregungen betrachtet, in Analogie zu den Elektronanregungen in (5.6). Die Elektron/Loch-Anregungslücke aus der Spin-down-Funktion (5.15) beträgt $E_g^{N=3} = 2t$, allerdings wird diese Energielücke aufgrund der vorhandenen Wechselwirkung linear mit wachsendem U verschoben.

Die hier geltenden Symmetriebeziehungen bezüglich ω (siehe Gleichung (5.8)) verdeutlichen somit erneut die Äquivalenz der Greenschen Funktionen in den Fällen $N = 1$ und $N = 3$ mit der damit verbundenen Elektron-Loch-Symmetrie.

$$\begin{aligned} G_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot G_{ij\downarrow}^{N=1}(-\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -\frac{U}{2} \\ G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot G_{ij\uparrow}^{N=1}(-\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -U. \end{aligned} \quad (5.17)$$

5.4 Eigenschaften der spektralen Gewichte

Die in den Abschnitten 5.1 bis 5.3 berechneten Greenschen Funktionen wurden mit Hilfe der Matrixelemente bestimmt. Die Produkte dieser Übergangsamplituden ergeben die sogenannten spektralen Gewichte; sie werden in diesem Abschnitt kurz besprochen.

Die spektralen Gewichte $\tilde{a}_{k\sigma}(t, U)$ (bzw. $\tilde{b}_{k\sigma}(t, U)$) (mit einem Nummerierungsindex k) geben für ein Elektron (bzw. Loch) mit dem Spin σ an, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist,

5.4 Eigenschaften der spektralen Gewichte

dass dieses am selben Gitterplatz ein weiteres Elektron (bzw. Loch) mit entgegengesetztem Spin $-\sigma$ antrifft oder auf einen leeren Gitterplatz (bzw. auf ein Elektron) trifft (vgl. [Nol09]). Sie sind demnach ein Maß für die spektrale Stärke der entsprechenden Elektron- bzw. Lochanregung.

Die Summation über die spektralen Gewichte einer Greenschen Funktion muss gemäß der Normierungsbedingung immer Eins ergeben. Sind $\tilde{a}_{k\sigma}^N(t, U)$ und $\tilde{b}_{k\sigma}^N(t, U)$ die spektralen Gewichte von $G_{ij\sigma}^N$, so gilt:

$$\sum_k (\tilde{a}_{k\sigma}^N(t, U) + \tilde{b}_{k\sigma}^N(t, U)) = 1. \quad (5.18)$$

Wie man anhand den Greenschen Funktionen für $N = 1$ bis $N = 3$ erkennen kann, gibt es neben den konstanten Gewichten auch drei unterschiedliche, von $\frac{U}{t}$ abhängige Terme. Diese sind im folgenden aufgeführt:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 = \frac{((c-U)+4t)^2}{4 \cdot (16t^2 + (c-U)^2)} \\ \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)} \right)^2 = \frac{((c+U)-4t)^2}{4 \cdot (16t^2 + (c+U)^2)} \\ \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) &= \frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 = \frac{((c-U)-4t)^2}{4 \cdot (16t^2 + (c-U)^2)} \quad , \end{aligned} \quad (5.19)$$

mit a, b und c aus (4.14). Die dazugehörigen Definitionsbereiche \mathcal{A} sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}) &:= \{(t, U) \in \mathbb{R}^2 \setminus (0, U); U \geq 0\} \\ \mathcal{A}(\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}) &:= \{(t, U) \in \mathbb{R}^2 \setminus (0, U); U \leq 0\} \\ \mathcal{A}(\tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}) &:= \{(t, U) \in \mathbb{R}^2 \setminus (0, U); U \geq 0\} \quad . \end{aligned} \quad (5.20)$$

Die Definitionsbereiche der spektralen Gewichte bestehen demnach aus geschlitzten (t, U) -Ebenen ohne die Halbgeraden bei $t = 0$ und $U \geq 0$ ($\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U)$ und $\tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U)$) bzw. bei $t = 0$ und $U \leq 0$ ($\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U)$). Betrachtet man die Grenzfälle der spektralen Gewichte, so finden wir die Relationen:

$$\begin{aligned} \lim_{U/t \rightarrow 0+} \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}\left(\frac{U}{t}\right) &= \frac{1}{2} & \lim_{U/t \rightarrow \infty} \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}\left(\frac{U}{t}\right) &= \frac{1}{4} \\ \lim_{U/t \rightarrow 0+} \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}\left(\frac{U}{t}\right) &= 0 & \lim_{U/t \rightarrow \infty} \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}\left(\frac{U}{t}\right) &= \frac{1}{4} \\ \lim_{U/t \rightarrow 0+} \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}\left(\frac{U}{t}\right) &= 0 & \lim_{U/t \rightarrow \infty} \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}\left(\frac{U}{t}\right) &= \frac{1}{4} \quad . \end{aligned} \quad (5.21)$$

Die Forderung (5.18) ist in allen vorliegenden Fällen erfüllt, denn es gilt

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) + \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 + \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)} \right)^2 = \frac{1}{2} \\ \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) + \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 + \frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 = \frac{1}{2} \quad , \end{aligned} \quad (5.22)$$

was auch einfach nachzuweisen ist (siehe Anhang C, Seite 79). Hieraus folgt auch direkt, dass innerhalb des gemeinsamen Definitionsbereichs die beiden spektralen Gewichte

5 Die Greensche Funktion und Spektralfunktion

$\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U)$ und $\tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U)$ identisch sind, insbesondere auch innerhalb des für uns relevanten Bereiches $t > 0, U > 0$:

$$\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) \equiv \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) \quad \text{für} \quad \mathcal{A}_2 \cap \mathcal{A}_3. \quad (5.23)$$

Der Vergleich der beiden Terme $\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U)$ und $\tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U)$ sowie die Tatsache, dass $c(U) = c(-U)$ gilt, führt zur Feststellung, dass die spektralen Gewichte symmetrisch in U sind, das heißt $\tilde{a}(t, U) = \tilde{a}(t, -U)$.

Zur Veranschaulichung sind in der folgenden Abbildung die von t und U abhängigen spektralen Gewichte als Funktion des Verhältnisses $\frac{U}{t}$ aufgetragen:

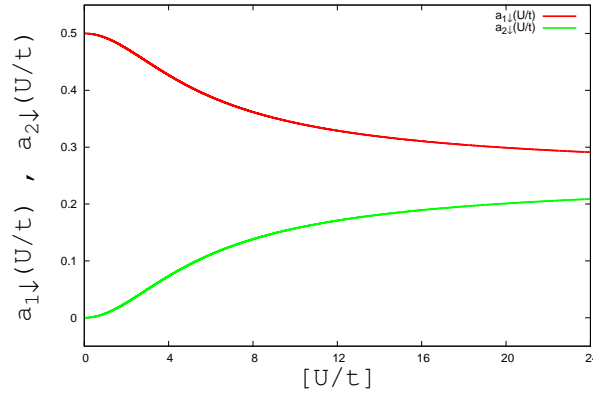


Abbildung 5.1: Die spektralen Gewichte $\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(\frac{U}{t})$ und $\tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(\frac{U}{t})$ in Abhängigkeit von $\frac{U}{t}$

Zusammenfassend sind in (5.24) die spektralen Gewichte der Greenschen Funktionen angegeben:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{1\uparrow}^{N=1}(t, U) &= \tilde{b}_{1\uparrow}^{N=1}(t, U) = \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=3}(t, U) = \tilde{b}_{1\downarrow}^{N=3}(t, U) = \frac{1}{2} \\ \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \tilde{a}_{1\sigma}^{N=2}(t, U) = \tilde{b}_{1\sigma}^{N=2}(t, U) = \tilde{b}_{1\uparrow}^{N=3}(t, U) = \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 \\ \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) = \tilde{b}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) = \tilde{b}_{2\uparrow}^{N=3}(t, U) = \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)} \right)^2 \\ \tilde{a}_{3\downarrow}^{N=1}(t, U) &= \tilde{a}_{4\downarrow}^{N=1}(t, U) = \tilde{b}_{3\uparrow}^{N=3}(t, U) = \tilde{b}_{4\uparrow}^{N=3}(t, U) = \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

5.5 Die Spektralfunktion

Die Gesamtspektralfunktion ist definiert durch [Abr63]

$$\begin{aligned}
 \rho_{ij\sigma}(\omega) &= \rho_{ij\sigma}^+(\omega) + \rho_{ij\sigma}^-(\omega) \\
 &= \sum_n \langle \Psi_{N,0} | c_{i\sigma} | \Psi_{N+1,n} \rangle \langle \Psi_{N+1,n} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{N,0} \rangle \delta(\omega - (E_{N+1,n} - E_{N,0})) \\
 &\quad + \sum_n \langle \Psi_{N,0} | c_{j\sigma}^\dagger | \Psi_{N-1,n} \rangle \langle \Psi_{N-1,n} | c_{i\sigma} | \Psi_{N,0} \rangle \delta(\omega - (E_{N-1,n} - E_{N,0})) ,
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

das heißt als die Summe der beiden in (3.9) eingeführten Funktionen. Wie (3.10) verdeutlicht, ist $\rho_{ij\sigma}(\omega)$ eine Größe, die in direktem Zusammenhang mit der Greenschen Funktion steht. Genauer gesagt liefern uns die Spektralfunktionen das gesamte Einteilchen-Anregungsspektrum von Teilchen und Löchern. Der erste Term in (5.25), $\rho_{ij\sigma}^+(\omega)$ beschreibt die Elektronenanregungen, während der zweite Term, $\rho_{ij\sigma}^-(\omega)$ den Anregungen der Löcher entspricht. Die sich unmittelbar aus den Greenschen Funktionen ergebenden Spektralfunktionen können wir nun für alle Elektronenzahlen $N \in \{1, 2, 3\}$ angeben.

In den folgenden Unterabschnitten sind die berechneten Spektralfunktionen als Funktion der Energie $\tilde{\omega} = \frac{\omega}{t}$ und der Wechselwirkung $\tilde{U} = \frac{U}{t}$ abgebildet. Da in unserem Falle exakte Eigenwerte vorliegen, bestehen die Spektralfunktionen aus gewichteten Delta-Distributionen. Zur graphischen Veranschaulichung haben wir daher eine Lorentz-Verbreiterung der Delta-Peaks mit einer endliche Breite von $\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{t} = 0,1$ einführt (siehe Anhang E.2 auf Seite 85), für den Energienullpunkt wurde $\epsilon_0 = 0$ gewählt. Die Farbcodierung dient der visuellen Verdeutlichung der gewichteten Anregungs-Peaks.

5.5.1 Spektralfunktionen für $N = 1$

$$\begin{aligned}
 \rho_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 + t)) + \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 - t)) \\
 \rho_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 + t - \frac{1}{2}(c - U))) + \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{1}{2}(c + U))) \\
 &\quad + \frac{1}{4} \cdot \delta(\omega - (U + \epsilon_0 + t)) + \frac{1}{4} \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 + t))
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Das Anregungsspektrum der Spektralfunktion $\rho_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega)$ (siehe Abb. 5.2) ist eine direkte Folge des Pauli-Prinzips. Aufgrund der Tatsache, dass sich auf dem gleichen Platz keine zwei Elektronen mit der selben Spinquantenzahl befinden dürfen, kann das hinzugefügte Elektron mit $\sigma = \uparrow$ nur den anderen noch freien Platz einnehmen, wo es in unserer Betrachtung auch nicht die Coulombabstoßung des ersten Elektrons spüren kann. Somit ist in diesem Falle kein Hüpfen zwischen den Plätzen möglich. Wie aus der Greenschen Funktion hervorgeht, ist entsprechend bei der Elektronenpropagation die einzige nichtverschwindende

5 Die Greensche Funktion und Spektralfunktion

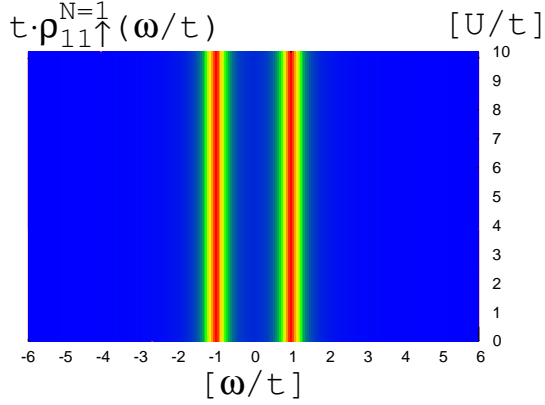


Abbildung 5.2: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\uparrow}(\tilde{\omega})$ für $N = 1$

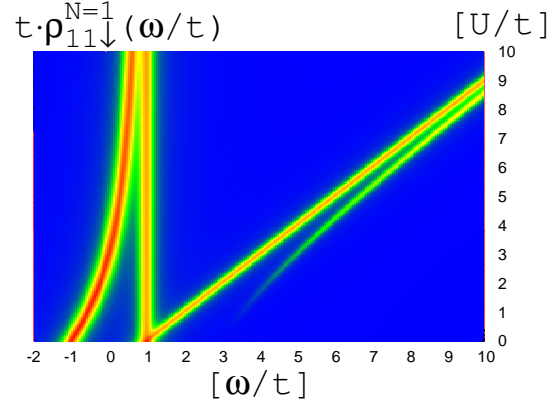


Abbildung 5.3: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\downarrow}(\tilde{\omega})$ für $N = 1$

Übergangsamplitude beim Übergang vom Zustand $|\Psi_{1,0}\rangle$ zu $|\Psi_{2,4}\rangle$ zu finden. Eine analoge Argumentation können wir auch für die Lochanregung aufführen, das bedeutet für den Übergang $|\Psi_{1,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{0,0}\rangle$. Hier kann selbstverständlich nur ein Spin-up-Elektron vernichtet bzw. ein Spin-up-Loch erzeugt werden. Damit ist auch ersichtlich, dass das Elektron-Loch-Anregungsgap unabhängig von U ist.

Wie in Abbildung 5.3 zu sehen, ist das Anregungsspektrum von $\rho_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega)$ vielfältiger. Dies liegt daran, dass das zu betrachtende Spin-down-Elektron nun beide Plätze einnehmen und damit auch mit dem Spin-up-Elektron des Grundzustands wechselwirken kann. Allerdings ist hierbei zu beachten, dass es im Gegensatz zum obigen Fall nur Elektronenanregungen gibt. Im Grenzfall $U \rightarrow 0$ gilt allerdings verständlicherweise: $\rho_{ij\downarrow, U=0}^{N=1}(\omega) = \rho_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega)$.

Von Null verschiedene Übergangsamplituden liefern gemäß des Pauli-Prinzips sowohl der Übergang zum Grundzustand $|\Psi_{2,0}\rangle$ als auch der zu den ersten drei angeregten Zuständen $|\Psi_{2,1}\rangle, |\Psi_{2,2}\rangle, |\Psi_{2,3}\rangle$. Während der Übergang zum Grundzustand $|\Psi_{1,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{2,0}\rangle$ die am stärksten gewichtete Anregung ausmacht, entspricht die Struktur mit der geringsten Intensität dem energetisch höchsten Anregungszustand und kann als Satellit der Elektronenanregung interpretiert werden $|\Psi_{1,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{2,1}\rangle$. Über die Spektralfunktion können wir außerdem das in Kapitel 4.2 erwähnte Verhalten der Eigenwerte im atomaren Limes nachvollziehen. Die spektrale Gewichtung ist dann für jede Anregung gleich einem Viertel und führt zu vier gleichgewichteten Peaks.

5.5.2 Spektralfunktionen für $N = 2$

$$\begin{aligned} \rho_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = & \tilde{a}_{1\sigma}^{N=2}(t, U) \cdot \left(\delta\left(\omega - \left(\epsilon_0 - t + \frac{1}{2}(c + U)\right)\right) + \delta\left(\omega - \left(\epsilon_0 + t - \frac{1}{2}(c - U)\right)\right) \right) \\ & + \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) \cdot \left(\delta\left(\omega - \left(\epsilon_0 + t + \frac{1}{2}(c + U)\right)\right) + \delta\left(\omega - \left(\epsilon_0 - t - \frac{1}{2}(c - U)\right)\right) \right) \end{aligned} \quad (5.27)$$

Die Spektralfunktion $\rho_{ij\sigma}^{N=2}(\omega)$ veranschaulicht die in Kapitel 5.2 diskutierten Elektron- und Lochanregungen. Zu sehen ist das Elektron/Loch-Anregungsgap, das gemäß Gleichung (5.13) mit zunehmender Wechselwirkungsstärke U wächst. Außerdem bilden sich mit zunehmender Coulombabstoßung die Satellitenstrukturen heraus. Aufgrund der Symmetrieeigenschaft (5.11) erhalten wir für $N = 2$ sowohl für Spin-up als auch Spin-down die selbe Spektralfunktion. Zu erwähnen sei schließlich auch die erkennbare Symmetrierelation bezüglich der Energie ω (5.12).

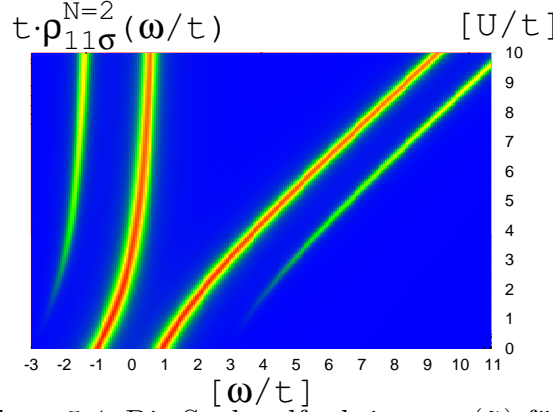


Abbildung 5.4: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\sigma}(\tilde{\omega})$ für $N = 2$

Die Elektronenanregung $|\Psi_{2,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{3,0}\rangle$ mit der dazugehörigen Satellitanregung $|\Psi_{2,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{3,2}\rangle$ sind in der Summe mit ein halb gewichtet. Genauso verhält es sich auch mit der Lochanregung $|\Psi_{2,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{1,1}\rangle$ und der entsprechenden Satellitenstruktur $|\Psi_{2,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{1,3}\rangle$. Auch bei $\rho_{ij\sigma}^{N=2}(\omega)$ sind gemäß der spektralen Gewichte die Übergänge zu den Grundzuständen gegenüber den Satellitanregungen stets bevorzugt. Allerdings verschiebt sich auch hier die Gewichtung mit steigendem U zugunsten der Satellitanregungen, so dass im Grenzfall $U \rightarrow \infty$ alle Anregungen gleichwahrscheinlich sind.

Abbildung 5.4 verdeutlicht neben den angesprochenen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den unterschiedlichen Zuständen den konstanten, von U unabhängigen Shift zwischen Elektron- bzw. Lochanregung und der Satellitenstruktur von $2t$. Dies entspricht dem energetischen Abstand des bindenden und antibindenden Zustands des Ein- bzw. Drei-Elektronensystems.

5.5.3 Spektralfunktionen für $N = 3$

$$\begin{aligned}
 \rho_{i\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \tilde{b}_{1\uparrow}^{N=3}(t, U) \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{1}{2}(c + U))) + \tilde{b}_{2\uparrow}^{N=3}(t, U) \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 - t - \frac{1}{2}(c - U))) \\
 &\quad + \frac{1}{4} \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 - t)) + \frac{1}{4} \cdot \delta(\omega - (\epsilon_0 - t + U)) \\
 \rho_{i\downarrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (U + \epsilon_0 + t)) + \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (U + \epsilon_0 - t))
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

5 Die Greensche Funktion und Spektralfunktion

Die Abbildungen 5.5 und 5.6 verdeutlichen visuell die Analogie bzw. Elektron-Loch-

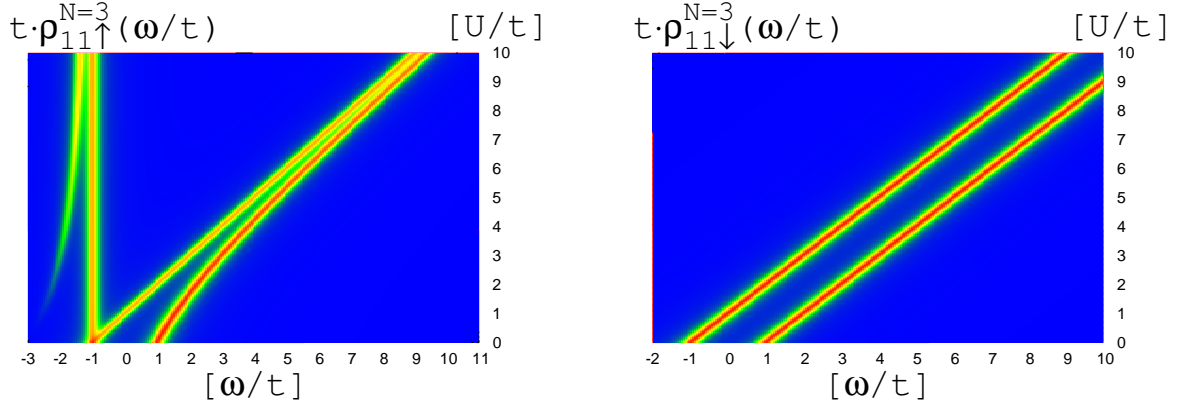


Abbildung 5.5: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\uparrow}(\tilde{\omega})$ für $N = 3$ Abbildung 5.6: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\downarrow}(\tilde{\omega})$ für $N = 3$

Symmetrie zwischen den Fällen $N = 1$ und $N = 3$. Bei $\rho_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega)$ liegt analog zu $\rho_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega)$ eine Elektronanregung $|\Psi_{3,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{4,0}\rangle$ und eine Lochanregung $|\Psi_{3,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{2,4}\rangle$ unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips vor. In Figur 5.6 ist die in Kapitel 5.3 angesprochene U -lineare Verschiebung der Anregungspeaks zu sehen. Sie ist darauf zurückzuführen, dass im Zustand $|\Psi_{3,0}\rangle$ stets zwei Elektronen mit unterschiedlicher Spinquantenzahl einen Platz besetzen und daher miteinander wechselwirken können.

Die Spektralfunktion $\rho_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega)$ beinhaltet ausschließlich Lochanregungen, wobei die höchste spektrale Intensität der Übergang in den Grundzustand aufweist $|\Psi_{3,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{2,0}\rangle$ und die Satellitenstruktur aus dem Übergang in den energetisch höchsten Zustand $|\Psi_{3,0}\rangle \rightarrow |\Psi_{2,2}\rangle$ hervorgeht. Obwohl der Elektron- und der Loch-Zustand sich um U verschieben, bleibt das Gap von $2t$ für $\rho_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega)$ erhalten.

6 Inverse Greensfunktionen und Selbstenergie

Mit Hilfe der Selbstenergie lässt sich ein Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem zurückführen. So beinhaltet die Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ den gesamten Einfluss der Elektron-Elektron-Wechselwirkungen auf Einteilchenniveau. Es handelt sich dabei um eine in der Regel komplexwertige Größe, deren Realteil die Energie und deren Imaginärteil die Lebensdauer der Quasiteilchen angibt [Bec10, Nol09].

Berechnet wird die Selbstenergie mittels der Dyson-Gleichung:

$$\Sigma(\omega) = \mathbf{G}_{U=0}^{-1}(\omega) - \mathbf{G}^{-1}(\omega) . \quad (6.1)$$

Fasst man die bereits ermittelten Greenschen Funktionen gemäß (6.1) in einer Matrix $\mathbf{G}(\omega)$ zusammen, erhält man die folgende Darstellung:

$$\mathbf{G}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{1\uparrow 1\uparrow}(\omega) & G_{1\uparrow 2\uparrow}(\omega) & G_{1\uparrow 1\downarrow}(\omega) & G_{1\uparrow 2\downarrow}(\omega) \\ G_{2\uparrow 1\uparrow}(\omega) & G_{2\uparrow 2\uparrow}(\omega) & G_{2\uparrow 1\downarrow}(\omega) & G_{2\uparrow 2\downarrow}(\omega) \\ G_{1\downarrow 1\uparrow}(\omega) & G_{1\downarrow 2\uparrow}(\omega) & G_{1\downarrow 1\downarrow}(\omega) & G_{1\downarrow 2\downarrow}(\omega) \\ G_{2\downarrow 1\uparrow}(\omega) & G_{2\downarrow 2\uparrow}(\omega) & G_{2\downarrow 1\downarrow}(\omega) & G_{2\downarrow 2\downarrow}(\omega) \end{pmatrix} . \quad (6.2)$$

Zusammen mit Gleichung (5.1) und den oben genannten Relationen (5.7), (5.11) und (5.16) vereinfacht sich diese Matrix zu

$$\mathbf{G}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{11\uparrow}(\omega) & G_{12\uparrow}(\omega) & 0 & 0 \\ G_{12\uparrow}(\omega) & G_{11\uparrow}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{11\downarrow}(\omega) & G_{12\downarrow}(\omega) \\ 0 & 0 & G_{12\downarrow}(\omega) & G_{11\downarrow}(\omega) \end{pmatrix} . \quad (6.3)$$

Dies ist die bereits in Kapitel 5 angesprochene Blockdiagonalität von $\mathbf{G}(\omega)$. Im Falle $N = 2$ kommt es wegen (5.11) zu einer weiteren Vereinfachung der Matrix in dem Sinne, dass die beiden Diagonalblöcke identisch sind.

Mit Hilfe dieser Vereinfachungen ergibt sich unmittelbar die Matrix der inversen Greensfunktionen $\mathbf{G}^{-1}(\omega)$:

$$\mathbf{G}^{-1}(\omega) = \begin{pmatrix} G_{11\uparrow}^{-1}(\omega) & G_{12\uparrow}^{-1}(\omega) & 0 & 0 \\ G_{12\uparrow}^{-1}(\omega) & G_{11\uparrow}^{-1}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{11\downarrow}^{-1}(\omega) & G_{12\downarrow}^{-1}(\omega) \\ 0 & 0 & G_{12\downarrow}^{-1}(\omega) & G_{11\downarrow}^{-1}(\omega) \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

6 Inverse Greensfunktionen und Selbstenergie

mit den inversen Greensfunktionen

$$G_{ij\sigma}^{-1}(\omega) = (-1)^{i-j} \frac{G_{ij\sigma}(\omega)}{(G_{11\sigma}(\omega))^2 - (G_{12\sigma}(\omega))^2} ; \quad i, j \in \{1, 2\} . \quad (6.5)$$

Natürlich sind auch die beiden Diagonalblöcke von $\mathbf{G}^{-1}(\omega)$ im Falle $N = 2$ wieder gleich.

6.1 Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 1$

Betrachten wir den Fall mit $N = 1$ Elektronen, so gibt es vier verschiedene inverse Greensfunktionen zu bestimmen. Man erhält mit (6.5) die folgenden Resultate

$$\begin{aligned} G_{11\uparrow, N=1}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 \\ G_{12\uparrow, N=1}^{-1}(\omega) &= t - i \cdot \delta . \end{aligned} \quad (6.6)$$

Da hierbei $G_{11\uparrow, N=1}^{-1}(\omega)$ und $G_{12\uparrow, N=1}^{-1}(\omega)$ nicht von U abhängen, gilt für die Selbstenergie

$$\Sigma_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) = 0 . \quad (6.7)$$

Für $G_{11\downarrow, N=1}^{-1}(\omega)$ und $G_{12\downarrow, N=1}^{-1}(\omega)$ gelangt man mit Hilfe der Substitution $z := \omega - \epsilon_0 - t + i \cdot \delta$ und den Relationen

$$\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) + \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) = \frac{1}{2} \quad \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) - \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) = \frac{2t}{c} \quad (6.8)$$

zu den Ausdrücken

$$\begin{aligned} G_{11\downarrow, N=1}^{-1}(\omega) &= \frac{16z^3 + (-24U - 16t)z^2 + (8U^2 + 16tU - 32t^2)z + 16t^2U}{8 \cdot (2z^2 + (-2U - 4t)z + \frac{1}{2}U^2 + 2tU)} \\ G_{12\downarrow, N=1}^{-1}(\omega) &= \frac{16tz^2 - (16tU + 32t^2)z + 16t^2U}{8 \cdot (2z^2 + (-2U - 4t)z + \frac{1}{2}U^2 + 2tU)} . \end{aligned} \quad (6.9)$$

Setzt man in (6.9) $U = 0$ ein, so folgt daraus

$$\begin{aligned} G_{11\downarrow, N=1, U=0}^{-1}(\omega) &= \frac{16z^3 - 16tz^2 - 32t^2z}{8 \cdot (2z^2 - 4tz)} = \omega - \epsilon_0 + i\delta \\ G_{12\downarrow, N=1, U=0}^{-1}(\omega) &= \frac{16tz^2 - 32t^2z}{8 \cdot (2z^2 - 4tz)} = t . \end{aligned} \quad (6.10)$$

Nach Anwendung der Dyson-Gleichung (6.1) erhält man schließlich die Selbstenergien

$$\begin{aligned} \Sigma_{11\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{2Uz^2 + (-U^2 - 4tU)z + tU^2}{4z^2 + (-4U - 8t)z + U^2 + 4tU} \\ \Sigma_{12\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{tU^2}{4z^2 + (-4U - 8t)z + U^2 + 4tU} , \end{aligned} \quad (6.11)$$

6.2 Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 2$

die mit Hilfe der Partialbruchzerlegung wie folgt dargestellt werden können:

$$\Sigma_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) = \frac{U^2}{8} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - \frac{U}{2} - (t + \epsilon_0) + i\delta} + \frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - (3t + \epsilon_0) + i\delta} \right] + \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2}. \quad (6.12)$$

Die Spezialfälle ergeben

$$\Sigma_{ij\downarrow, U=0}^{N=1}(\omega) = 0 \quad \Sigma_{ij\downarrow, t=0}^{N=1}(\omega) = \delta_{ij} \cdot \left[\frac{U^2}{4} \left(\frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0 + i\delta} \right) + \frac{U}{2} \right]. \quad (6.13)$$

Das Ergebnis (6.7) verdeutlicht erneut, dass das Spin-up-Grundzustands-Elektron gemäß des Pauli-Prinzips nicht mit einem anderen Spin-up-Elektron wechselwirken kann. Das zweite Spin-up-Elektron kann ausschließlich den bislang unbesetzten Platz einnehmen und erfährt aufgrund der On-site-Wechselwirkung folglich keine Coulombabstoßung.

Im Gegensatz dazu erhalten wir allerdings eine Spin-down-Selbstenergie (6.12), da in diesem Fall wie bereits besprochen das Spin-up-Elektron und das hinzugefügte Spin-down-Elektron miteinander wechselwirken können. Der Selbstenergie-Term enthält hierbei die Anregungen von Elektronen und Löchern $E_{ab,b}^{N=1} = \epsilon_0 \pm t$, verschoben um die Anregungsenergie eines Elektron-Loch-Paares von $E_g^{N=1} = 2t$.

Selbstverständlich verschwindet die Selbstenergie im wechselwirkungsfreien Fall (6.13), in Übereinstimmung mit der Definition (6.1). Im atomaren Limes wird die Selbstenergie für unterschiedliche Platz-Indizes Null, während bei Betrachtung der gleichen Orte stets ein Selbstenergie-Term vorhanden bleibt im Einklang mit der gegebenen On-site-Wechselwirkung.

6.2 Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 2$

Auch im Fall von $N = 2$ Elektronen behilft man sich mit zwei geeigneten Substitutionen, nämlich $\tilde{z} := \omega - \epsilon_0 - t - \frac{U}{2}$ und $k := -\frac{1}{2}c + i\delta$. Unter Berücksichtigung von (6.8) und den Vereinfachungen

$$\begin{aligned} (\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U))^2 - (\tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U))^2 &= \frac{1}{2}(\tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) - \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U)) \\ \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) \cdot \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) &= \frac{U^2}{16c^2} \end{aligned} \quad (6.14)$$

erhalten wir für unsere inversen Greensfunktionen

$$\begin{aligned} G_{11\sigma, N=2}^{-1}(\omega) &= \frac{\tilde{z}^3 + 3t\tilde{z}^2 + (2t^2 + \frac{8kt^2}{c} - k^2)\tilde{z} + \frac{8kt^3}{c} - k^2t}{\tilde{z}^2 + 2t\tilde{z} + \frac{8kt^2}{c} - \frac{16k^2t^2}{c^2}} \\ G_{12\sigma, N=2}^{-1}(\omega) &= \frac{(-t - \frac{4kt}{c})\tilde{z}^2 + (-2t^2 - \frac{8kt^2}{c})\tilde{z} - tk^2 + \frac{4k^3t}{c} - \frac{8kt^3}{c}}{\tilde{z}^2 + 2t\tilde{z} + \frac{8kt^2}{c} - \frac{16k^2t^2}{c^2}}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

6 Inverse Greensfunktionen und Selbstenergie

Nach Umformung der Ausdrücke und Rücksubstitution ergibt sich als Ergebnis

$$\begin{aligned}
& G_{ij\sigma, N=2}^{-1}(\omega) \\
&= \frac{(-64\delta^2 - 64ic\delta + 16c^2)t^2 + 4c^2\delta^2 + 4ic^3\delta - c^4}{4c(2c\omega - cU + (8i\delta - 6c)t - 2c\epsilon_0)} + \delta_{ij} \cdot \frac{2\omega - U - 2\epsilon_0}{2} \\
&+ \frac{(-64\delta^2 - 64ic\delta + 16c^2)t^2 + 4c^2\delta^2 + 4ic^3\delta - c^4}{4c(2c\omega - cU - (8i\delta - 6c)t - 2c\epsilon_0)} \cdot (-1)^{(i-j)} - (1 - \delta_{ij}) \cdot \frac{(4i\delta - c)t}{c},
\end{aligned} \tag{6.16}$$

wobei sich für $U = 0$ die Funktionen vereinfachen lassen zu

$$\begin{aligned}
G_{11\sigma, N=2, U=0}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 \\
G_{12\sigma, N=2, U=0}^{-1}(\omega) &= t - i\delta.
\end{aligned} \tag{6.17}$$

Im Grenzfall $\delta \rightarrow 0$ kann der Ausdruck (6.16) mit Hilfe der Relation

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{8c^2} \cdot (64\delta^2 t^2 + 64ic\delta t^2 - 16c^2 t^2 - 4c^2\delta^2 - 4ic^3\delta + c^4) = \frac{U^2}{8} \tag{6.18}$$

vereinfacht werden und es ergibt sich für die Selbstenergie (siehe Anhang D.1, Seite 81) schließlich das Ergebnis

$$\Sigma_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = \frac{U^2}{8} \left[\frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - (3t + \epsilon_0) + i\eta} + \frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - \frac{U}{2} - (-3t + \epsilon_0) - i\eta} \right] + \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2}, \tag{6.19}$$

mit der neu eingeführten, infinitesimal kleinen positiven Größe $\eta := 4\frac{\delta t}{c}$, wobei auch $\eta \rightarrow 0$ gilt. Weiterhin können nun auch direkt die Grenzfälle angegeben werden:

$$\Sigma_{ij\sigma, U=0}^{N=2}(\omega) = 0 \quad \Sigma_{ij\sigma, t=0}^{N=2}(\omega) = \delta_{ij} \cdot \left[\frac{U^2}{8} \left(\frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0 + i\eta} + \frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0 - i\eta} \right) + \frac{U}{2} \right]. \tag{6.20}$$

Die Spin-Symmetrie für $N = 2$ findet sich in der Symmetrie der Selbstenergie (6.19) wieder. Gemäß des Grundzustandes $|\Psi_{2,0}\rangle$ sind für $U > 0$ immer Wechselwirkungen möglich und $\Sigma_{ij\sigma}^{N=2}(\omega)$ ist unabhängig von der Spinquantenzahl σ . Wie die Pole erkennen lassen, beinhaltet die Selbstenergie die Anregungsenergie eines Elektrons bzw. Lochs ($\epsilon_0 \pm t$), die um die Anregungsenergie $2t$ eines Elektron-Loch-Paares zu tieferen bzw. höheren Energien verschoben ist (Shake-up- und Shake-off-Effekt). Dies weist von vornherein auf die Möglichkeit der Elektron-Loch-Paar-Satelliten hin.

Die Betrachtung der Grenzfälle (6.20) lässt die gleiche Argumentation wie im ersten Fall zu und führt uns dementsprechend zu identischen bzw. vergleichbaren Grenzwerten der Selbstenergie.

6.3 Inverse Greensfunktion und Selbstenergie für $N = 3$

In Anbetracht der mehrfach genannten Elektron-Loch-Symmetrie ist die Situation vergleichbar mit dem Fall $N = 1$. Die ersten beiden inversen Greensfunktionen mit Spin-down lauten

$$\begin{aligned} G_{11\downarrow, N=3}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - U \\ G_{12\downarrow, N=3}^{-1}(\omega) &= t - i \cdot \delta. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Bis auf das U im ersten Ausdruck sind beide Terme mit denen in (6.6) identisch. Daraus resultiert für die Selbstenergie

$$\Sigma_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) = \delta_{ij} \cdot U. \quad (6.22)$$

Die Spin-up-Ausdrücke lassen sich mit (6.8) und der Substitution $\hat{z} := \omega - \epsilon_0 + t - i\delta$ schreiben als

$$\begin{aligned} G_{11\uparrow, N=3}^{-1}(\omega) &= \frac{16\hat{z}^3 + (-24U + 16t)\hat{z}^2 + (8U^2 - 16tU - 32t^2)\hat{z} + 16t^2U}{8 \cdot (2\hat{z}^2 + (-2U + 4t)\hat{z} + \frac{1}{2}U^2 - 2tU)} \\ G_{12\uparrow, N=3}^{-1}(\omega) &= \frac{16t\hat{z}^2 + (-16tu + 32t^2)\hat{z} - 16t^2U}{8 \cdot (2\hat{z}^2 + (-2U + 4t)\hat{z} + \frac{1}{2}U^2 - 2tU)}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Setzt man erneut für U den Wert Null ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} G_{11\uparrow, N=3, U=0}^{-1}(\omega) &= \frac{16\hat{z}^3 + 16t\hat{z}^2 - 32t^2\hat{z}}{8 \cdot (2\hat{z}^2 + 4t\hat{z})} = \omega - \epsilon_0 - i\delta \\ G_{12\uparrow, N=3, U=0}^{-1}(\omega) &= \frac{16t\hat{z}^2 + 32t^2\hat{z}}{8 \cdot (2\hat{z}^2 + 4t\hat{z})} = t, \end{aligned} \quad (6.24)$$

und damit für die Selbstenergie im Falle $N = 3$

$$\begin{aligned} \Sigma_{11\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{2U\hat{z}^2 + (-U^2 + 4tU)\hat{z} - tU^2}{4\hat{z}^2 + (8t - 4U)\hat{z} + U^2 - 4tU} \\ \Sigma_{12\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{tU^2}{4\hat{z}^2 + (8t - 4U)\hat{z} + U^2 - 4tU}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Nach Anwendung der Partialbruchzerlegung und Rücksubstitution ergibt sich schließlich

$$\Sigma_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) = \frac{U^2}{8} \left[\frac{1}{\omega - \frac{U}{2} + (3t - \epsilon_0) - i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - \frac{U}{2} + (t - \epsilon_0) - i\delta} \right] + \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2}. \quad (6.26)$$

Die Grenzwertbetrachtungen für U und t liefern die folgenden Werte:

$$\Sigma_{ij\uparrow, U=0}^{N=3}(\omega) = 0 \quad \Sigma_{ij\uparrow, t=0}^{N=3}(\omega) = \delta_{ij} \cdot \left[\frac{U^2}{4} \left(\frac{1}{\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0 - i\delta} \right) + \frac{U}{2} \right]. \quad (6.27)$$

Hierbei ist wieder schön die Symmetrie zwischen (6.26) und (6.12) ist sehen, wobei nun Lochanregungen vorliegen. Da nun immer ein Platz mit zwei Elektronen besetzt ist, folgt wie in (6.22) gezeigt, $\Sigma_{11\downarrow}^{N=3} = \Sigma_{22\downarrow}^{N=3} = U$. Wie man anhand der Abbildung 5.6 nachvollziehen kann, macht sich dieser Term bei der Spektralfunktion $\rho_{11\downarrow}^{N=3}(\omega)$ durch eine U -Verschiebung der Anregungsenergien bemerkbar.

6.4 Folgerungen

Aus den exakten Selbstenergien können nun unmittelbar die Hartree-Fock-Selbstenergien Σ_{HF} abgelesen werden. Dies sind genau die U -linearen, frequenzunabhängigen Terme: $\Sigma_{HF} \propto U$ [Bec10]. Die Korrelationsanteile der Selbstenergien werden dagegen durch die U^2 -proportionalen Terme ausgedrückt: $\Sigma_c \propto U^2$. Zur besseren Übersicht sind die Selbstenergien in Hartree-Fock-Näherung unten stehend aufgelistet:

$$\Sigma_{ij\sigma, HF}^{N=1} = \delta_{ij} \cdot \delta_{\downarrow\sigma} \cdot \frac{U}{2} \quad \Sigma_{ij\sigma, HF}^{N=2} = \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \quad \Sigma_{ij\sigma, HF}^{N=3} = \delta_{ij} \cdot \left(\frac{U}{2} + \delta_{\downarrow\sigma} \frac{U}{2} \right) \quad (6.28)$$

In den folgenden Abbildungen 6.1 bis 6.12 sind von den oben berechneten Selbstenergien die Realteile abzüglich der Hartree-Fock-Selbstenergie sowie die Imaginärteile als Funktion von $\frac{\omega}{t}$ aufgetragen. Die abgebildeten Real- und Imaginärteile zeigen somit folglich nur die Korrelationsanteile der Selbstenergie. Für die Darstellungen wählten wir $\epsilon_0 = 0$ und eine Breite von $\delta = 0,04$. Die Real- und Imaginärteile sowie deren Symmetrieeigenschaften sind im Kapitel D.2 des Anhangs ab Seite 81 angegeben.

Im Falle $N = 1$ befinden sich die Nullstellen der Korrelationspeaks bei den Energien $\omega_1^{N=1} = \frac{U}{2} + t + \epsilon_0$ und $\omega_2^{N=1} = \frac{U}{2} + 3t + \epsilon_0$. Das heißt, die beiden Peaks sind konstant um den Energiebetrag der Elektron-Loch-Anregung von $\Delta\omega^{N=1} = 2t$ auseinander gelegen und werden proportional zu $\frac{U}{2}$ zu höheren Energien verschoben. Eine weitere charakteristische Eigenschaft der Real- und Imaginärteile besteht in ihren Symmetrie- und Antisymmetrieverhältnissen (siehe Abb. 6.1 bis 6.4).

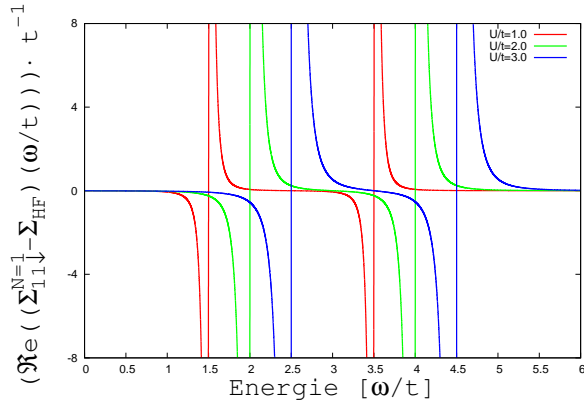


Abbildung 6.1: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\downarrow}^{N=1}(\tilde{\omega}) - \Sigma_{11\downarrow, HF}^{N=1})$

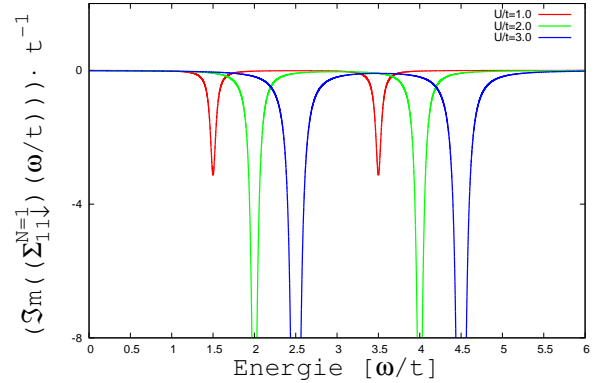
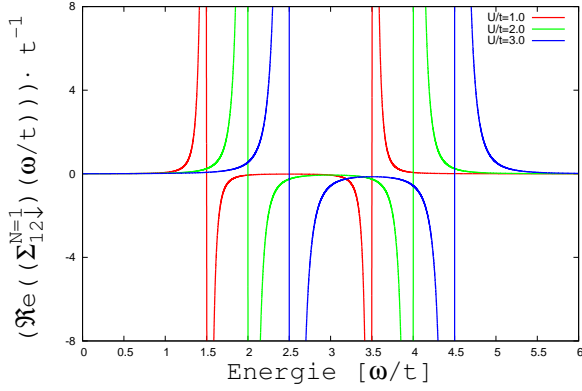
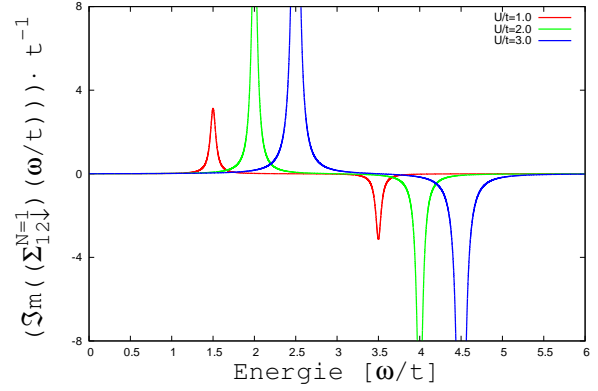
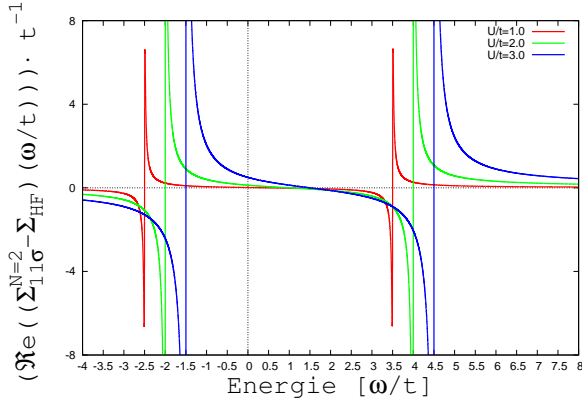
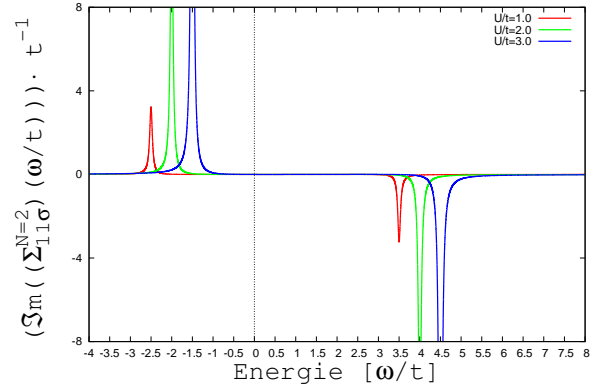


Abbildung 6.2: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{11\downarrow}^{N=1}(\tilde{\omega}))$

Bei $N = 2$ Elektronen erscheinen die Korrelationspeaks bei $\omega_1^{N=2} = \frac{U}{2} - 3t + \epsilon_0$ und $\omega_2^{N=2} = \frac{U}{2} + 3t + \epsilon_0$. Daraus resultiert nun eine Energielücke von der Größe der dreifachen Elektron-Loch-Anregungsenergie $\Delta\omega^{N=2} = 6t$. Ebenso wie im ersten Fall bleibt der Abstand zwischen den Korrelationspeaks unabhängig von U konstant. Es existiert lediglich eine Verschiebung der Peaks proportional zu $\frac{U}{2}$ (Abb. 6.5 bis 6.8).

Abbildung 6.3: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\downarrow}^{N=1}(\tilde{\omega}))$ Abbildung 6.4: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{12\downarrow}^{N=1}(\tilde{\omega}))$ Abbildung 6.5: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\sigma}^{N=2}(\tilde{\omega}) - \Sigma_{11\sigma, HF}^{N=2})$ Abbildung 6.6: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{11\sigma}^{N=2}(\tilde{\omega}))$

Für $N = 3$ Elektronen befinden sich die Korrelationspeaks bei $\omega_1^{N=3} = \frac{U}{2} - 3t + \epsilon_0$ und $\omega_2^{N=3} = \frac{U}{2} - t + \epsilon_0$, was wie im Falle $N = 1$ zu einem Energiegap von $\Delta\omega^{N=3} = 2t$ führt (Abb. 6.9 bis 6.12). Hieraus wird erneut die Elektron-Loch-Symmetrierelation zum Fall $N = 1$ ersichtlich.

6 Inverse Greensfunktionen und Selbstenergie

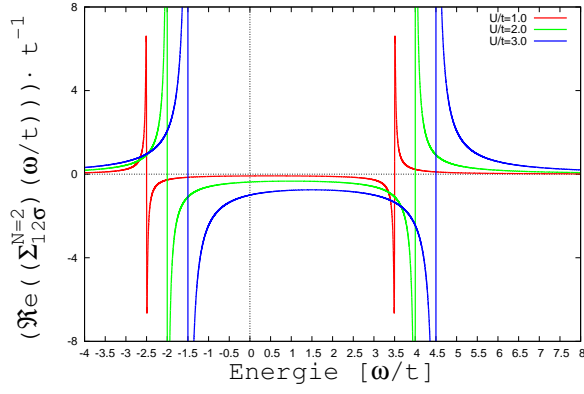


Abbildung 6.7: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\sigma}^{N=2}(\tilde{\omega}))$

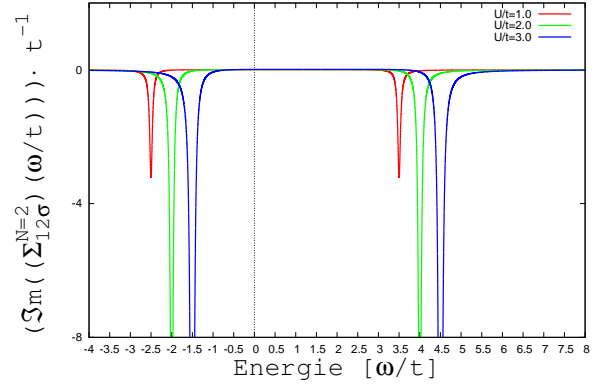


Abbildung 6.8: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{12\sigma}^{N=2}(\tilde{\omega}))$

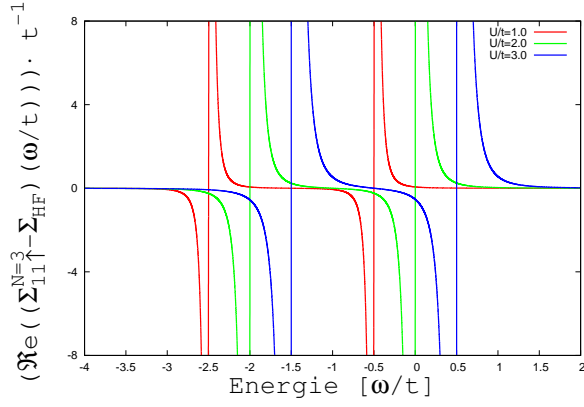


Abbildung 6.9: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\uparrow}^{N=3}(\tilde{\omega}) - \Sigma_{11\uparrow, HF}^{N=3}(\tilde{\omega}))$

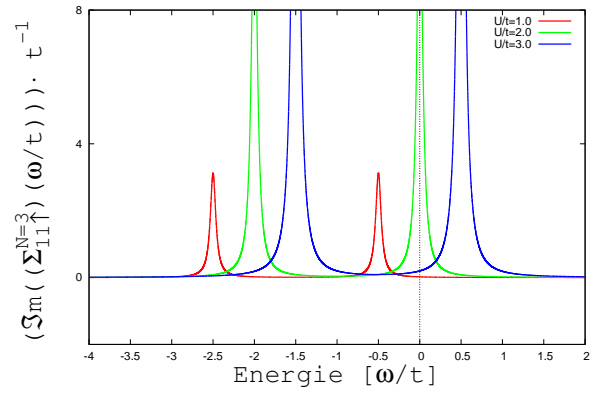


Abbildung 6.10: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{11\uparrow}^{N=3}(\tilde{\omega}) - \Sigma_{11\uparrow, HF}^{N=3}(\tilde{\omega}))$

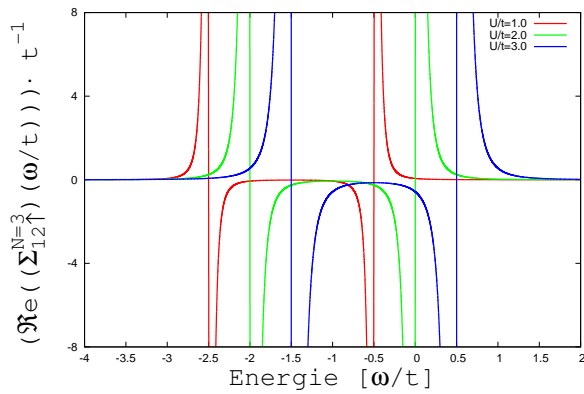


Abbildung 6.11: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\uparrow}^{N=3}(\tilde{\omega}))$

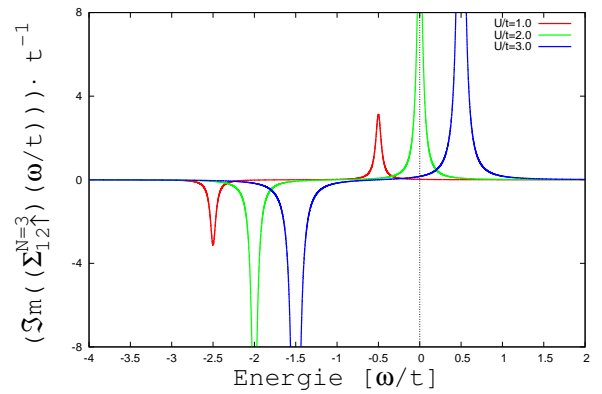


Abbildung 6.12: $\frac{1}{t} \cdot \Im(\Sigma_{12\uparrow}^{N=3}(\tilde{\omega}))$

7 Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung

Wie bereits erwähnt, sind die meisten zu untersuchenden Vielteilchensysteme nur näherungsweise lösbar, so dass man dementsprechend in der Theoretischen Festkörperphysik sehr oft auf approximative Lösungen angewiesen ist. Um eine Vorstellung zu erhalten, inwieweit sich eine solche Näherungsrechnung im Vergleich zur exakten Lösung auswirkt, behandeln wir in diesem Abschnitt das Hubbard-Cluster in Hartree-Fock-Näherung, einer in der Vielteilchenphysik weit verbreiteten Näherungsmethode. Dabei besteht das Ziel darin, die errechneten exakten Größen (Eigenenergien, Greensfunktionen, Selbstenergien) nun mit Hilfe dieser Methode auszurechnen, um danach die genauen Resultate mit den Hartree-Fock-Ergebnissen zu vergleichen.

Bei der Hartree-Fock-Näherung betrachten wir das elektronische System im Rahmen der Mean-Field-Theory. Das Ziel dieser Theorie besteht darin, das Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem zu reduzieren. Die Wechselwirkungen der Elektronen mit einem bestimmten Elektron werden dabei durch ein mittleres Wechselwirkungspotential ausgetauscht. Für den Hubbard-Hamiltonian heißt das, dass anstelle des Wechselwirkungsterms ein Term ohne Zweiteilchenwechselwirkung verwendet wird [Elk79].

In Bezug auf das mittlere Wechselwirkungsfeld betrachten wir das Operatorenprodukt von $\hat{n}_{i\uparrow} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}$ und $\hat{n}_{i\downarrow} = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$, und stellen die Operatoren in Form einer Summe aus dem Mittelwert und eines Fluktuationsterms dar [Elk79].

$$\begin{aligned}\hat{n}_{i\downarrow}\hat{n}_{i\uparrow} &= c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} = \left[\langle n_{i\downarrow} \rangle + (c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle) \right] \left[\langle n_{i\uparrow} \rangle + (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle) \right] \\ &\approx \langle n_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + \langle n_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle.\end{aligned}\quad (7.1)$$

Dies kann als eine gute Näherung aufgefasst werden, solange die Fluktuationen $c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle$ so klein sind, dass sie vernachlässigt werden können. Der quadratische Fluktuationsterm wird hierbei also außer Acht gelassen. Des Weiteren gehen wir von einem homogenen System aus, das so groß ist, dass Randbedingungen vernachlässigt werden können [Don98].

Mit Hilfe dieser Näherung lautet der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Approximation somit

$$\hat{\mathcal{H}}_{HF} = -t \sum_{\sigma} \left[c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} \right] + \epsilon_0 \sum_{\sigma, i=1,2} n_{i\sigma} + U \sum_{i=1,2} \left[\langle n_{i\downarrow} \rangle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + \langle n_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle \langle n_{i\uparrow} \rangle \right]. \quad (7.2)$$

7 Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung

Als ersten Iterationsschritt wählen wir einen geeignet erscheinenden Lösungsansatz, um innerhalb des Hartree-Fock-Verfahrens eine in sich widerspruchsfreie, selbstkonsistente Lösung zu erhalten [Lin97].

Zur Berechnung der Hamilton-Matrix und der Hartree-Fock-Eigenwerte werden daher die Besetzungszahlen $\langle n_{i\sigma} \rangle \equiv \langle \Psi_{N,m}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{N,m}^{HF} \rangle$ des Grundzustands und der angeregten Zustände (mit der Elektronenzahl N und dem Zustandsindex m) genommen. Für die Fälle $N \in \{1, 3\}$ stellen die exakten Eigenzustände aus (4.8) und (4.20) eine geeignete Wahl der Hartree-Fock-Eigenzustände dar. Im Falle $N = 2$ sind es die Zustände aus (4.13), wobei für $|\Psi_{2,0}^{HF}\rangle$ und $|\Psi_{2,1}^{HF}\rangle$ der Grenzfall $U = 0$ genommen wird.

Damit ergeben sich die folgenden Besetzungszahlen:

$$\begin{aligned}
 \langle n_{i\sigma} \rangle &= \frac{1}{2} \cdot \delta_{\sigma\uparrow} && \text{für } |\Psi_{1,0}^{HF}\rangle, |\Psi_{1,2}^{HF}\rangle && \langle n_{i\sigma} \rangle &= \frac{1}{2} \cdot \delta_{\sigma\downarrow} && \text{für } |\Psi_{1,1}^{HF}\rangle, |\Psi_{1,3}^{HF}\rangle \\
 \langle n_{i\sigma} \rangle &= \frac{1}{2} && \text{für } |\Psi_{2,0}^{HF}\rangle, \dots, |\Psi_{2,3}^{HF}\rangle \\
 \langle n_{i\sigma} \rangle &= \delta_{\sigma\uparrow} && \text{für } |\Psi_{2,4}^{HF}\rangle && \langle n_{i\sigma} \rangle &= \delta_{\sigma\downarrow} && \text{für } |\Psi_{2,5}^{HF}\rangle \\
 \langle n_{i\sigma} \rangle &= \delta_{\sigma\uparrow} + \frac{1}{2} \cdot \delta_{\sigma\downarrow} && \text{für } |\Psi_{3,0}^{HF}\rangle, |\Psi_{3,2}^{HF}\rangle && \langle n_{i\sigma} \rangle &= \delta_{\sigma\downarrow} + \frac{1}{2} \cdot \delta_{\sigma\uparrow} && \text{für } |\Psi_{3,1}^{HF}\rangle, |\Psi_{3,3}^{HF}\rangle.
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Bei Anwendung des Hamilton-Operators auf die Basiszustände werden die dem Basiszustand entsprechenden Besetzungszahlen verwendet. Das bedeutet:

$$\begin{aligned}
 \boxed{N=1} \quad & |\uparrow, 0\rangle, |0, \uparrow\rangle : && \langle \Psi_{1,0}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{1,0}^{HF} \rangle && \text{bzw.} && \langle \Psi_{1,2}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{1,2}^{HF} \rangle \\
 & |\downarrow, 0\rangle, |0, \downarrow\rangle : && \langle \Psi_{1,1}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{1,1}^{HF} \rangle && \text{bzw.} && \langle \Psi_{1,3}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{1,3}^{HF} \rangle \\
 \boxed{N=2} \quad & |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle : && \langle \Psi_{2,0}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,0}^{HF} \rangle && \dots && \langle \Psi_{2,3}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,3}^{HF} \rangle \\
 & |\uparrow, \uparrow\rangle : && \langle \Psi_{2,4}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,4}^{HF} \rangle \\
 & |\downarrow, \downarrow\rangle : && \langle \Psi_{2,5}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,5}^{HF} \rangle \\
 & |\uparrow\downarrow, 0\rangle, |0, \uparrow\downarrow\rangle : && \langle \Psi_{2,0}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,0}^{HF} \rangle && \dots && \langle \Psi_{2,3}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{2,3}^{HF} \rangle \\
 \boxed{N=3} \quad & |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle : && \langle \Psi_{3,0}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{3,0}^{HF} \rangle && \text{bzw.} && \langle \Psi_{3,2}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{3,2}^{HF} \rangle \\
 & |\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle : && \langle \Psi_{3,1}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{3,1}^{HF} \rangle && \text{bzw.} && \langle \Psi_{3,3}^{HF} | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_{3,3}^{HF} \rangle
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

Somit erhalten wir die Hartree-Fock genäherten Ergebnisse.

7.1 Hartree-Fock-Näherung für $N = 1$ Elektronen

Nach einer Rechnung analog zum exakten Fall ergibt sich damit die folgende Hamilton-Matrix:

$$\hat{\mathcal{H}}_{HF}^{N=1} \equiv \hat{\mathcal{H}}^{N=1} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 & -t & 0 \\ 0 & \epsilon_0 & 0 & -t \\ -t & 0 & \epsilon_0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (7.5)$$

mit den Eigenvektoren und Eigenwerten

$$\begin{aligned} E_{1,0}^{HF} &\equiv E_{1,0} = \epsilon_0 - t & |\Psi_{1,0}^{HF}\rangle &\equiv |\Psi_{1,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0\rangle + |0, \uparrow\rangle) \\ E_{1,1}^{HF} &\equiv E_{1,1} = \epsilon_0 - t & |\Psi_{1,1}^{HF}\rangle &\equiv |\Psi_{1,1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, 0\rangle + |0, \downarrow\rangle) \\ E_{1,2}^{HF} &\equiv E_{1,2} = \epsilon_0 + t & |\Psi_{1,2}^{HF}\rangle &\equiv |\Psi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, 0\rangle - |0, \uparrow\rangle) \\ E_{1,3}^{HF} &\equiv E_{1,3} = \epsilon_0 + t & |\Psi_{1,3}^{HF}\rangle &\equiv |\Psi_{1,3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, 0\rangle - |0, \downarrow\rangle). \end{aligned} \quad (7.6)$$

Wie man sehen kann, sind diese Hartree-Fock genäherten Ergebnisse identisch zu denen des exakten Falls. Dies ist auch einfach nachzuvollziehen, da nur ein Teilchen vorhanden ist und damit keine Wechselwirkung mit einem anderen Elektron existiert.

7.2 Hartree-Fock-Näherung für $N = 2$ Elektronen

Die Hartree-Fock genäherte Hamilton-Matrix lautet für $N = 2$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{HF}^{N=2} = \begin{pmatrix} 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} & 0 & 0 & 0 & -t & -t \\ 0 & 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} & 0 & 0 & +t & +t \\ 0 & 0 & 2\epsilon_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_0 & 0 & 0 \\ -t & +t & 0 & 0 & 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} & 0 \\ -t & +t & 0 & 0 & 0 & 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.7)$$

7 Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung

Die sich hieraus ergebenden Eigenwerte und Eigenvektoren sind:

$$\begin{aligned}
 E_{2,0}^{HF} &= 2\epsilon_0 - 2t + \frac{U}{2} & |\Psi_{2,0}^{HF}\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,1}^{HF} &= 2\epsilon_0 + 2t + \frac{U}{2} & |\Psi_{2,1}^{HF}\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,2}^{HF} &= 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} & |\Psi_{2,2}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{2,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 E_{2,3}^{HF} &= 2\epsilon_0 + \frac{U}{2} & |\Psi_{2,3}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{2,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle) \\
 E_{2,4}^{HF} &= 2\epsilon_0 & |\Psi_{2,4}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{2,4}\rangle &= |\uparrow, \uparrow\rangle \\
 E_{2,5}^{HF} &= 2\epsilon_0 & |\Psi_{2,5}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{2,5}\rangle &= |\downarrow, \downarrow\rangle.
 \end{aligned} \tag{7.8}$$

Die ersten vier Eigenwerte sind, wie man direkt erkennen kann, identisch mit denen des exakten Falls für $U = 0$ plus einem Term $\frac{U}{2}$: $E_{2,k}^{HF} = E_{2,k}(U = 0) + \frac{U}{2}$ für $k \in \{1, \dots, 4\}$. Speziell die Eigenwerte $E_{2,2}^{HF}$ und $E_{2,3}^{HF}$ sind nun zweifach entartet, wobei deren Wert dem Mittelwert der beiden exakten Eigenwerte $E_{2,2}$ und $E_{2,3}$ entspricht. Bei diesen ersten vier Eigenzuständen $|\Psi_{2,0}^{HF}\rangle, \dots, |\Psi_{2,3}^{HF}\rangle$, bei denen Elektronenwechselwirkung möglich ist, macht sich also das mittlere Wechselwirkungsfeld in Form eines $\frac{U}{2}$ -Terms bemerkbar. Die letzten beiden Energien bleiben dagegen unverändert: $E_{2,4}^{HF} \equiv E_{2,4}$ und $E_{2,5}^{HF} \equiv E_{2,5}$, da die Elektronen der entsprechenden Eigenzustände $|\Psi_{2,4}^{HF}\rangle$ und $|\Psi_{2,5}^{HF}\rangle$ nicht miteinander wechselwirken. Zur Veranschaulichung der Eigenenergien im Fall $N = 2$ sind diese in Abbildung 7.1 über $\frac{U}{t}$ aufgetragen ($2\epsilon_0$ ist hierbei wieder als Nullpunkt gewählt). Sowohl die Terme in (7.8)

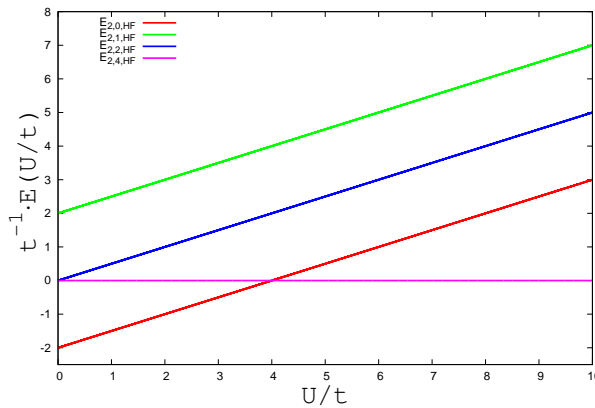


Abbildung 7.1: Gesamt-Energieeigenwerte in Hartree-Fock-Näherung für $N = 2$ als Funktion der Wechselwirkung $\frac{U}{t}$.

als auch Figur 7.1 machen die zu $\frac{U}{2}$ proportionale Energieverschiebung der Eigenwerte $E_{2,0}^{HF}, \dots, E_{2,3}^{HF}$ deutlich. Darüber hinaus ist erkennbar, dass die vier ersten Eigenwerte für alle U konstant um den Energiebetrag einer Elektron-Loch-Anregung von $2t$ auseinander

7.3 Hartree-Fock-Näherung für $N = 3$ Elektronen

liegen:

$$E_{2,1}^{HF} - E_{2,2}^{HF} = 2t \qquad E_{2,2}^{HF} - E_{2,0}^{HF} = 2t . \quad (7.9)$$

Im Gegensatz zum exakten Fall (4.13) kreuzen sich im Hartree-Fock-Fall zwei Energiegeraden, nämlich die Geraden von $E_{2,0}^{HF}$ und $E_{2,4}^{HF}$. So haben wir bei $U = 4t$ eine energetische Entartung der beiden dazugehörigen Zustände vorliegen und für $U > 4t$ gilt offensichtlich: $E_{2,0}^{HF}(U > 4t) > E_{2,4}^{HF}(U > 4t)$.

7.3 Hartree-Fock-Näherung für $N = 3$ Elektronen

Die sich ergebende Hamilton-Matrix

$$\hat{\mathcal{H}}_{HF}^{N=3} = \begin{pmatrix} 3\epsilon_0 + U & 0 & t & 0 \\ 0 & 3\epsilon_0 + U & 0 & t \\ t & 0 & 3\epsilon_0 + U & 0 \\ 0 & t & 0 & 3\epsilon_0 + U \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

führt, wie bereits gezeigt, zu den Eigenwerten bzw. Eigenvektoren

$$\begin{aligned} E_{3,0}^{HF} \equiv E_{3,0} &= 3\epsilon_0 - t + U & |\Psi_{3,0}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{3,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \\ E_{3,1}^{HF} \equiv E_{3,1} &= 3\epsilon_0 - t + U & |\Psi_{3,1}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{3,1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle) \\ E_{3,2}^{HF} \equiv E_{3,2} &= 3\epsilon_0 + t + U & |\Psi_{3,2}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{3,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle) \\ E_{3,3}^{HF} \equiv E_{3,3} &= 3\epsilon_0 + t + U & |\Psi_{3,3}^{HF}\rangle \equiv |\Psi_{3,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle) . \end{aligned} \quad (7.11)$$

Die hier vorliegende Situation ist wieder vergleichbar mit dem Fall $N = 1$. Neben einem voll besetzten Platz mit einem Spin-up- und einem Spin-down-Elektron existiert ein ungepaartes Elektron, das den verbliebenen Platz einnimmt und folglich keine Wechselwirkung mit den ersten beiden Elektronen eingehen kann. Auf Grund dessen sind die Eigenenergien und Eigenzustände unabhängig von der Art der Wechselwirkung und wir erhalten keine Veränderung zum exakten Ergebnis.

7.4 Folgerungen

Man erkennt sofort, dass der Lösungsansatz mit den gewählten Hartree-Fock-Eigenfunktionen und Besetzungszahlen unmittelbar zur selbstkonsistenten Lösung des Problems führt, denn die sich aus der Rechnung ergebenden Eigenwerte und Besetzungszahlen sind

7 Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung

die selben, die man vorgegeben hatte. Das heißt, wir erhalten unmittelbar nach einem Iterationsschritt unser Ergebnis.

Die aus der Berechnung folgenden Greenschen Funktionen lauten für $N = 1$:

$$\begin{aligned} G_{ij\uparrow, HF}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right] \\ G_{ij\downarrow, HF}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{U}{2}) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{U}{2}) + i\delta} \right]. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Bei $N = 2$ ist die Greenschen Funktion symmetrisch in σ , und wir erhalten damit das folgende Ergebnis:

$$G_{ij\sigma, HF}^{N=2}(\omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{U}{2}) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{U}{2}) - i\delta} \right]. \quad (7.13)$$

Schließlich gibt es die unten stehend aufgeführten Hartree-Fock genäherten Greenschen Funktionen für $N = 3$:

$$\begin{aligned} G_{ij\uparrow, HF}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t + \frac{U}{2}) - i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + \frac{U}{2}) - i\delta} \right] \\ G_{ij\downarrow, HF}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t + U) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t + U) - i\delta} \right]. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Aus den Ergebnissen sieht man sofort, dass die beiden Greensfunktionen $G_{ij\uparrow, HF}^{N=1}(\omega)$ und $G_{ij\downarrow, HF}^{N=3}(\omega)$ identisch mit denen des exakten Falls sind:

$$G_{ij\uparrow, HF}^{N=1}(\omega) = G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) \quad \text{und} \quad G_{ij\downarrow, HF}^{N=3}(\omega) = G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega). \quad (7.15)$$

Die Ursache dafür ist wieder beim Pauli-Prinzip zu finden. Denn wie bereits erläutert, kann für $N = 1$ ein hinzugefügtes Spin-up-Elektron keine Wechselwirkung mit dem anderen Elektron eingehen. Daher ist es für die allgemeine Betrachtung irrelevant, ob man ein mittleres Feld betrachtet oder die exakte Wechselwirkung. Analog dazu ist die Argumentation für den Fall $N = 3$, wenn nun ein Spin-down-Loch erzeugt wird.

Im Gegensatz dazu kommt die Wirkung des mittleren Feldes bzw. die Vernachlässigung quadratischer Fluktuationen bei den verbliebenen Greensfunktionen zum Tragen. Dies sind natürlich genau diejenigen Funktionen, bei denen Wechselwirkungen zwischen Spin-up- und Spin-down-Elektronen möglich sind, das heißt $G_{ij\downarrow, HF}^{N=1}(\omega)$, $G_{ij\sigma, HF}^{N=2}(\omega)$ und $G_{ij\uparrow, HF}^{N=3}(\omega)$.

Offensichtlich reduziert sich das Anregungsspektrum jeder dieser Funktionen auf jeweils zwei Anregungen mit einem energetischen Abstand von $E_g = 2t$, was der Elektron-Loch-Anregung entspricht. Die Energielücke wird in diesen Fällen proportional zu $\frac{U}{2}$ verschoben. Der Unterschied zwischen den Greenschen Funktionen ist nur noch über die Polstellen auszumachen. So erkennt man, dass $G_{ij\downarrow, HF}^{N=1}(\omega)$ zwei Elektronanregungen, $G_{ij\sigma, HF}^{N=2}(\omega)$ je eine Elektron- und ein Lochanregung und $G_{ij\uparrow, HF}^{N=3}(\omega)$ zwei Lochanregungen beschreibt.

Die zugehörigen spektralen Gewichte sind wechselwirkungsunabhängig gleich ein halb. Dies hat zur Folge, dass die Satellitenstrukturen in der Hartree-Fock genäherten Spektralfunktion verschwinden. Einen weiteren wichtigen Aspekt finden wir darin, dass die Spektralfunktion dieser soeben genannten Greensfunktionen gleich ist:

$$\rho_{ij\downarrow, HF}^{N=1}(\omega) = \rho_{ij\sigma, HF}^{N=2}(\omega) = \rho_{ij\uparrow, HF}^{N=3}(\omega) = \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (\frac{U}{2} + \epsilon_0 + t)) + \frac{1}{2} \cdot \delta(\omega - (\frac{U}{2} + \epsilon_0 - t)). \quad (7.16)$$

Wie man insgesamt feststellen kann, führen die Hartree-Fock genäherten Greensfunktionen (7.12) bis (7.14), verglichen mit den Funktionen des wechselwirkungsfreien Systems (D.8), zu einer Verschiebung der Anregungsenergien um die Hartree-Fock-Selbstenergie $\Sigma_{ij\sigma}^{HF}$. Die gemeinsame Spektralfunktion (7.16) ist in Abbildung 7.2 zu sehen.

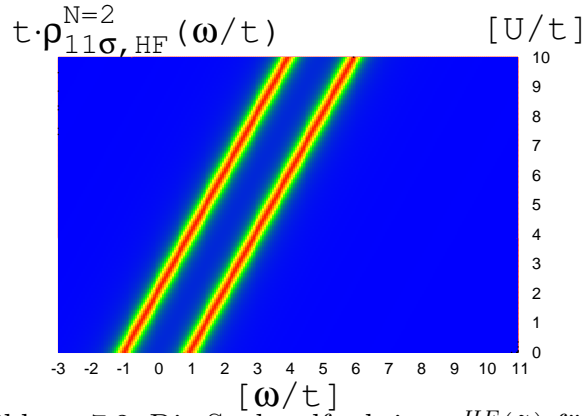


Abbildung 7.2: Die Spektralfunktion $\rho_{ij\sigma}^{HF}(\tilde{\omega})$ für $N = 2$

Inverse Greensfunktion und Selbstenergie

Aufgrund der wesentlich vereinfachten Hartree-Fock-Greensfunktionen sind die dazugehörigen inversen Greensfunktionen sowie die Selbstenergien recht einfach herzuleiten. So finden wir die folgenden Ergebnisse:

Für $N = 1$ Elektronen

$$\begin{aligned} G_{HF,11\uparrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 \implies \Sigma_{11\uparrow}^{HF} = 0 \\ G_{HF,12\uparrow}^{-1}(\omega) &= t - i\delta \implies \Sigma_{12\uparrow}^{HF} = 0 \\ G_{HF,11\downarrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - \frac{U}{2} + i\delta \implies \Sigma_{11\downarrow}^{HF} = +\frac{U}{2} \\ G_{HF,12\downarrow}^{-1}(\omega) &= t \implies \Sigma_{12\downarrow}^{HF} = 0 \end{aligned} \quad (7.17)$$

Für $N = 2$ Elektronen

$$\begin{aligned} G_{HF,11\uparrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - \frac{U}{2} \implies \Sigma_{11\uparrow}^{HF} = +\frac{U}{2} \\ G_{HF,12\uparrow}^{-1}(\omega) &= t - i\delta \implies \Sigma_{12\uparrow}^{HF} = 0 \\ G_{HF,11\downarrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - \frac{U}{2} \implies \Sigma_{11\downarrow}^{HF} = +\frac{U}{2} \\ G_{HF,12\downarrow}^{-1}(\omega) &= t - i\delta \implies \Sigma_{12\downarrow}^{HF} = 0 \end{aligned} \quad (7.18)$$

Für $N = 3$ Elektronen

$$\begin{aligned} G_{HF,11\uparrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - \frac{U}{2} - i\delta \implies \Sigma_{11\uparrow}^{HF} = +\frac{U}{2} \\ G_{HF,12\uparrow}^{-1}(\omega) &= t \implies \Sigma_{12\uparrow}^{HF} = 0 \\ G_{HF,11\downarrow}^{-1}(\omega) &= \omega - \epsilon_0 - U \implies \Sigma_{11\downarrow}^{HF} = +U \\ G_{HF,12\downarrow}^{-1}(\omega) &= t - i\delta \implies \Sigma_{12\downarrow}^{HF} = 0 \end{aligned} \quad (7.19)$$

Es gibt des Weiteren noch eine alternative Möglichkeit, die Selbstenergie zu bestimmen. So gilt für die Selbstenergie in Hartree-Fock-Näherung im Frequenzraum [Bec10, Hon07]:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\beta}^{HF}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \sum_{\gamma} \int d\mathbf{x}'' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') \langle \psi_{\gamma}^{\dagger}(\mathbf{x}'') \psi_{\gamma}(\mathbf{x}'') \rangle \\ &\quad - \delta_{\alpha\beta} U(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\beta}(\mathbf{x}') \rangle, \end{aligned} \quad (7.20)$$

mit der mittleren Teilchendichte $\langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\beta}(\mathbf{x}) \rangle$ und der Austauschdichte $\langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\beta}(\mathbf{x}') \rangle$. Der erste Term ist der Hartree-Term und beschreibt die Wechselwirkung des betrachteten Teilchens mit der Ladungsdichte der vorhandenen Elektronen. Der zweite Term repräsentiert den Fock- oder Austauschterm und steht für die Austauschwechselwirkung. Um (7.20) in der Site-Spin-Darstellung auszudrücken, verwenden wir

$$\Sigma_{i\sigma j\sigma'}^{HF} = \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \phi_{i\sigma}^*(\mathbf{x}, \alpha) \Sigma_{\alpha\beta}^{HF}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi_{j\sigma'}(\mathbf{x}', \beta). \quad (7.21)$$

Die Hartree-Fock-Selbstenergie ist in der Spin-Quantenzahl σ diagonal. Da zudem die Matrixelemente der Wechselwirkung $\hat{\mathcal{U}}$ Platzdiagonalität besitzen, folgt:

$$\Sigma_{i\sigma j\sigma'}^{HF} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} U \cdot \left(\sum_{\sigma''} \langle g | \hat{n}_{i\sigma''} | g \rangle - \langle g | \hat{n}_{i\sigma} | g \rangle \right), \quad (7.22)$$

mit der mittleren Teilchendichte des jeweiligen Grundzustands $\langle g | \hat{n}_{i\sigma} | g \rangle$, das heißt $|g\rangle \equiv |\Psi_{N,0}\rangle$. Wegen

$$\begin{aligned} N = 1 & \quad \langle g | \hat{n}_{i\uparrow} | g \rangle = \frac{1}{2} & \quad \langle g | \hat{n}_{i\downarrow} | g \rangle = 0 \\ N = 2 & \quad \langle g | \hat{n}_{i\uparrow} | g \rangle = \frac{1}{2} & \quad \langle g | \hat{n}_{i\downarrow} | g \rangle = \frac{1}{2} \\ N = 3 & \quad \langle g | \hat{n}_{i\uparrow} | g \rangle = 1 & \quad \langle g | \hat{n}_{i\downarrow} | g \rangle = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (7.23)$$

kommen wir zu den folgenden Ergebnissen:

$$\Sigma_{ij\sigma}^H = \delta_{ij} \cdot \frac{1}{2} U N \qquad \Sigma_{ij\sigma}^F = \delta_{ij} \cdot (-U \langle g | \hat{n}_{i\sigma} | g \rangle), \quad (7.24)$$

und damit schließlich zu

$$\Sigma_{ij\sigma}^{HF} = \Sigma_{ij\sigma}^H + \Sigma_{ij\sigma}^F = U \langle g | \hat{n}_{i-\sigma} | g \rangle. \quad (7.25)$$

Dieses Ergebnis stimmt völlig überein mit den bereits abgeleiteten Hartree-Fock-Selbstenergien (6.28) in Kapitel 6 und den Ergebnissen (7.17) bis (7.19) dieses Kapitels 7.4. Somit liegt also eine in sich geschlossene Darstellungsmöglichkeit für die Hartree-Fock-Selbstenergie vor.

Die Hartree-Fock-Approximation liefert uns frequenzunabhängige Energiewerte ohne Berücksichtigung der Korrelationseffekte. Dies ist der oben diskutierten Tatsache geschuldet, dass man anstatt der Wechselwirkung zweier Elektronen nur die Wechselwirkung eines Elektrons mit einem effektiven Feld, das durch die mittlere Verteilung der anderen Elektronen erzeugt wird, betrachtet [Elk79].

7 *Der Hamilton-Operator in Hartree-Fock-Näherung*

8 Die G_0W_0 -Näherung

Die GW -Näherung ist eine in der Festkörpertheorie verwendete Methode, die zur numerischen Lösung von Vielteilchenproblemen eingesetzt wird. Diese Methode ermöglicht es uns, einen genäherten Austausch- und Korrelationsanteil der Selbstenergie zu ermitteln [Bec10, Röd05]. In diesem Kapitel wollen wir diese Größe in G_0W_0 -Näherung (das bedeutet für den Fall $U = 0$) herleiten und mit dem Austausch-Korrelations-Anteil der exakten Selbstenergie vergleichen, um zu sehen, in welchen Fällen diese Approximation eine gute Übereinstimmung mit dem exakten Resultat liefert.

8.1 Zeitgeordnete Dichtekorrelationsfunktion

Wir beginnen mit der Darstellung der zeitgeordneten Dichtekorrelationsfunktion

$$L_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') = -i\hbar G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t') G(\mathbf{x}', \mathbf{x}; t' - t) . \quad (8.1)$$

Dabei schließen wir jetzt der Einfachheit halber die Spinvariable in den Raumindex mit ein. Mit der Abkürzung $\tau = t - t'$ lautet die Fouriertransformierte

$$L_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\Omega\tau} L_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) . \quad (8.2)$$

Um L_0 zu berechnen, setzen wir die Fouriertransformierte von $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau)$ ein

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) , \quad (8.3)$$

und erhalten damit

$$L_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \Omega) = -\frac{i\hbar}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\Omega\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega\tau} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' e^{i\omega'\tau} G(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \omega') \quad (8.4)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) G(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \omega') \delta(\Omega + \omega' - \omega) \quad (8.5)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) G(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \omega - \Omega) \quad (8.6)$$

8 Die G_0W_0 -Näherung

Für nicht wechselwirkende Teilchen ist die Dichtekorrelationsfunktionen $L_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau)$ hierbei identisch mit der Polarisationsfunktion $P(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \tau)$.

Um die Selbstenergie in der G_0W_0 -Näherung zu erhalten, benötigen wir zunächst die Polarisationsfunktion. Diese wird aus den Greenschen Funktionen für den Grenzfall $U = 0$ (Random Phase Approximation) mit Hilfe von (8.6) errechnet, daher auch die Bezeichnung G_0W_0 -Approximation. Für die Greenschen Funktionen gilt (für $i, j \in \{1, 2\}$)

$$G_{ij\uparrow, U=0}^{N=1}(\omega) = G_{ij\uparrow, U=0}^{N=2}(\omega) = \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{i-j}}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right], \quad (8.7)$$

das heißt, im Falle von $\sigma = \uparrow$ haben wir für die zu betrachteten Elektronenzahlen $N \in \{1, 2\}$ dieselben Polarisationsfunktionen $P_{ij\uparrow}^{N=1,2}(\omega)$. Die im Spin nicht diagonalen Polarisationsfunktionen spielen in der Abschirmung für Systeme mit kollinearem Spin keine Rolle [Röd05].

Für $P_{ij\uparrow}^{N=1,2}(\omega)$ erhalten wir somit

$$\begin{aligned} P_{ij\uparrow}^{N=1,2}(\omega) &= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G_{ij}(\omega') G_{ij}(\omega' - \omega) \\ &= -\frac{i\hbar}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \cdot \frac{1}{\omega} \left[\left(\frac{-1}{\omega' - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega' - \omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} \right) \right. \\ &\quad + \frac{(-1)^{i-j}}{\omega - 2t + 2i\delta} \left(\frac{-1}{\omega' - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega' - \omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right) \\ &\quad + \frac{(-1)^{i-j}}{\omega + 2t - 2i\delta} \left(\frac{-1}{\omega' - (\epsilon_0 - t) - i\delta} + \frac{1}{\omega' - \omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} \right) \\ &\quad \left. + \frac{1}{\omega} \left(\frac{-1}{\omega' - (\epsilon_0 - t) - i\delta} + \frac{1}{\omega' - \omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right) \right], \end{aligned} \quad (8.8)$$

und nach Anwendung des Residuensatzes schließlich (hier ist wiederum $\hbar \equiv 1$ gesetzt)

$$P_{ij\uparrow}^{N=1,2}(\omega) = \frac{(-1)^{i-j}}{4} \left(\frac{1}{\omega - 2t + 2i\delta} - \frac{1}{\omega + 2t - 2i\delta} \right). \quad (8.9)$$

Die Polarisationsfunktion für wechselwirkungsfreie Teilchen wird also durch die Anregung von Elektron-Loch-Paaren mit der Energie $2t$ bestimmt. Für den umgekehrten Spin $\sigma = \downarrow$ und $N = 1$ verschwindet die Polarisationsfunktion offensichtlich, das heißt es gilt $P_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) = 0$. Mit $P(\omega) := P_{11\uparrow}(\omega)$ können wir somit unmittelbar die Polarisationsfunktionsmatrix für $N = 1$ in der Orts-Spin-Darstellung angeben:

$$\hat{\mathcal{P}}^{N=1}(\omega) = \begin{pmatrix} P(\omega) & -P(\omega) & 0 & 0 \\ -P(\omega) & P(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.10)$$

8.1 Zeitgeordnete Dichtekorrelationsfunktion

Betrachten wir den Fall mit $N = 2$ Elektronen, so gilt wegen (5.11) die Beziehung $P_{ij\downarrow}^{N=2}(\omega) = P_{ij\uparrow}^{N=1,2}(\omega)$, so dass sich hieraus die Polarisationsmatrix

$$\hat{\mathcal{P}}^{N=2}(\omega) = \begin{pmatrix} P(\omega) & -P(\omega) & 0 & 0 \\ -P(\omega) & P(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P(\omega) & -P(\omega) \\ 0 & 0 & -P(\omega) & P(\omega) \end{pmatrix} \quad (8.11)$$

ergibt. Wenn wir nun den Fall mit $N = 3$ Elektronen hinzunehmen, so ist direkt erkennbar, dass $P_{ij\uparrow,U=0}^{N=1}(\omega) = P_{ij\downarrow,U=0}^{N=3}(\omega)$ gilt. Diese Relation führt uns schließlich unmittelbar zu

$$\hat{\mathcal{P}}^{N=3}(\omega) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P(\omega) & -P(\omega) \\ 0 & 0 & -P(\omega) & P(\omega) \end{pmatrix}, \quad (8.12)$$

im Einklang mit der Symmetrie zum Fall $N = 1$.

Mit Hinblick auf das im nachfolgenden Abschnitt 8.2 eingeführte abgeschirmte Coulomb-Potential sei an dieser Stelle bemerkt, dass alle Elektronen des Systems mit $N \in \{1, 2\}$ und alle Löcher im Falle $N \in \{2, 3\}$ zur elektronischen Polarisierbarkeit des Systems beitragen, was bei der Abschirmung mit einzubeziehen ist. Daher haben wir für den Fall $N = 2$ eine Änderung zu berücksichtigen, denn hierbei liegt ein nicht spinpolarisiertes System vor. Aus diesem Grund tragen beide Elektronen mit Spin-up und Spin-down gleichberechtigt zur Polarisierung bei.

Diesen Umstand gilt es bei der Berechnung der inversen dielektrischen Funktion miteinzubeziehen. Daher muss unabhängig davon, ob die Wechselwirkung von einem Spin-up- oder Spin-down-Elektron ausgeht, die Gesamtpolarisation genommen werden. Für $N = 1$ und $N = 3$ dagegen ändert sich nichts. Da $P_{ij\sigma}^{N=2}(\omega)$ unabhängig von i, j und σ (bis auf das Vorzeichen für $i \neq j$) ist, muss diese Polarisationsfunktion mit einem Faktor 2 multipliziert werden. So gilt für die spingemittelte Polarisierung

$$\bar{P}_{ij}(\omega) = \sum_{\sigma, \sigma'} P_{ij\sigma\sigma'}(\omega) = \sum_{\sigma} P_{ij\sigma}(\omega). \quad (8.13)$$

Das zweite Gleichheitszeichen in (8.13) ist gültig, da in unserem Falle die Polarisierung diagonal im Spin ist. Wie bereits gezeigt, ist $P_{ij\sigma}(\omega)$ unabhängig vom Spin und es gilt $P_{ij\sigma}(\omega) = (-1)^{(i-j)} \cdot P(\omega)$. Somit gilt generell für $N \in \{1, 2, 3\}$ in unabhängiger Teilchenapproximation, das heißt ohne Vertexkorrekturen, die Relation:

$$\bar{P}_{ij}(\omega) = (-1)^{(i-j)} \cdot (1 + \delta_{N2}) \cdot P(\omega). \quad (8.14)$$

8.2 Dielektrische Funktion und abgeschirmte Wechselwirkung

Mit Hilfe von $P(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ können wir die dielektrische Funktion $\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ berechnen:

$$\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x}'' U(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') P(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'; \omega), \quad (8.15)$$

wobei man bei Einschluss der Spinvariablen berücksichtigen muss, dass das Wechselwirkungspotential $U(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ nicht von den Spinvariablen abhängt. Der Wechsel zur Site-Spin-Darstellung führt uns wieder zu einer 4×4 -Matrix:

$$\varepsilon_{ij\sigma\sigma'}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x}' \phi_{i\sigma}^*(\mathbf{x}) \varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \phi_{j\sigma'}(\mathbf{x}'). \quad (8.16)$$

So ergibt sich

$$\varepsilon_{ij\sigma\sigma'}(\omega) = \delta_{ij} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} - \sum_{k,\sigma''} U_{ik\sigma\sigma''} \cdot P_{kj\sigma''\sigma'}(\omega), \quad (8.17)$$

mit der diagonalen Wechselwirkungsmatrix

$$\hat{\mathcal{U}} = U \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8.18)$$

Damit vereinfacht sich Gleichung (8.17) zu

$$\varepsilon_{ij\sigma\sigma'}(\omega) = \delta_{ij} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} - U \cdot P_{ij\sigma\sigma'}(\omega), \quad (8.19)$$

bzw. in Matrix-Schreibweise

$$\hat{\mathcal{E}}(\omega) = \mathbb{1} - \hat{\mathcal{U}} \cdot \hat{\mathcal{P}}(\omega) = \mathbb{1} - U \cdot \hat{\mathcal{P}}(\omega). \quad (8.20)$$

Da alle Größen spindagonal sind ($\sigma = \sigma'$) und wir, wie wir unten sehen werden, nur noch spingemittelte Größen zu betrachten haben, fällt der Spinfreiheitsgrad heraus, so dass sich die spingemittelte dielektrische Funktion in Form einer 2×2 -Matrix darstellen lässt:

$$\bar{\varepsilon}_{ij}(\omega) = \delta_{ij} - U \cdot \bar{P}_{ij}(\omega). \quad (8.21)$$

Wie bei der dielektrischen Funktion $\hat{\mathcal{E}}(\omega)$ und ihrer Inversen $\hat{\mathcal{E}}^{-1}(\omega)$ handelt es sich bei der abgeschirmten Wechselwirkung $\hat{\mathcal{W}}(\omega)$ ebenfalls um eine spinlose Größe in Form einer 2×2 -Matrix. Die abgeschirmte Wechselwirkung ist wie folgt definiert [Sch06]:

$$W(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x}'' \varepsilon^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}''; \omega) U(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}'). \quad (8.22)$$

8.2 Dielektrische Funktion und abgeschirmte Wechselwirkung

Beim Wechsel in die Orts-Darstellung kann diese Größe mittels Matrixmultiplikation ausgerechnet werden:

$$W_{ij}(\omega) = \sum_{j'} \bar{\epsilon}_{ij'}^{-1}(\omega) \cdot U \cdot \delta_{j'j} = U \cdot \bar{\epsilon}_{ij}^{-1}(\omega) . \quad (8.23)$$

Zum selben Ergebnis gelangt man auch über die Bethe-Salpeter-Gleichung [Bec10]. So lautet das Matrixelement des abgeschirmten Potentials in der Site-Darstellung

$$W_{ij}(\omega) = U \cdot \delta_{ij}(\omega) + U \cdot \sum_{j'} \bar{P}_{ij'}(\omega) \cdot W_{j'j}(\omega) . \quad (8.24)$$

Setzen wir für $\bar{P}_{ij}(\omega)$ die Relation (8.21) in (8.24) ein, so geht die Bethe-Salpeter-Gleichung für das abgeschirmte Potential über in

$$W_{ij}(\omega) = U \cdot \delta_{ij} + \sum_{j'} \delta_{ij'} \cdot W_{j'j}(\omega) - \sum_{j'} \bar{\epsilon}_{ij'}(\omega) \cdot W_{j'j}(\omega) , \quad (8.25)$$

woraus $U \delta_{ij} = \sum_{j'} \bar{\epsilon}_{ij'} W_{j'j}$ folgt . Über die Inversionsrelation der dielektrischen Funktion $\bar{\epsilon}_{ij}^{-1}(\omega)$,

$$\delta_{ij} = \sum_{j'} \bar{\epsilon}_{ij'}(\omega) \cdot \bar{\epsilon}_{j'j}^{-1}(\omega) = \sum_{j'} \bar{\epsilon}_{ij'}^{-1}(\omega) \cdot \bar{\epsilon}_{j'i}(\omega) \quad (8.26)$$

ergibt sich schließlich das Ergebnis aus (8.23). Für $N \in \{1, 2, 3\}$ können wir nun alle benötigten Größen in Form eines allgemein gültigen Ausdrucks angeben. So lautet die dielektrische Funktion $\hat{\mathcal{E}}(\omega)$ nach (8.21):

$$\hat{\mathcal{E}}_{N=1,2,3}(\omega) = \begin{pmatrix} 1 - U(1 + \delta_{N2})P(\omega) & U(1 + \delta_{N2})P(\omega) \\ U(1 + \delta_{N2})P(\omega) & 1 - U(1 + \delta_{N2})P(\omega) \end{pmatrix} \quad (8.27)$$

Die Invertierung von $\hat{\mathcal{E}}_{N=1,2,3}(\omega)$ liefert uns

$$\hat{\mathcal{E}}_{N=1,2,3}^{-1}(\omega) = \frac{1}{(2U(1 + \delta_{N2})P(\omega) - 1)} \cdot \begin{pmatrix} U(1 + \delta_{N2})P(\omega) - 1 & U(1 + \delta_{N2})P(\omega) \\ U(1 + \delta_{N2})P(\omega) & U(1 + \delta_{N2})P(\omega) - 1 \end{pmatrix} , \quad (8.28)$$

und für $\hat{\mathcal{W}}(\omega) = \hat{\mathcal{U}} \cdot \hat{\mathcal{E}}^{-1}(\omega)$ erhalten wir:

$$\hat{\mathcal{W}}_{N=1,2,3}(\omega) = U \cdot \hat{\mathcal{E}}_{N=1,2,3}^{-1}(\omega) , \quad (8.29)$$

mit der Größe

$$P(\omega) \equiv P_{11\uparrow}^{N=1,2}(\omega) = P_{11\downarrow}^{N=2,3}(\omega) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\omega - 2t + 2i\delta} - \frac{1}{\omega + 2t - 2i\delta} \right) = \frac{t - i\delta}{\omega^2 - 4(t - i\delta)^2} . \quad (8.30)$$

Für die Diagonal-Matrixelemente der dielektrischen Funktion $\hat{\mathcal{E}}(\omega)$ ergibt sich für $\omega \rightarrow 0$ das hinsichtlich der statischen Polarisierbarkeit des Systems zu erwartende Ergebnis, dass $\bar{\epsilon}_{ii}^{N=1,2,3}(\omega = 0) > 1$ sein muss, denn es gilt für $i \in \{1, 2\}$:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \bar{\epsilon}_{ii}^{N=1,2,3}(\omega) = 1 - U(1 + \delta_{N2})P(\omega)_{\omega \rightarrow 0} = 1 + \frac{U(1 + \delta_{N2})}{4t} > 1 \quad \text{da} \quad U, t > 0 . \quad (8.31)$$

8 Die G_0W_0 -Näherung

Des Weiteren können wir nun für das allgemeine Matrixelemente von $\hat{\mathcal{W}}(\omega)$ explizit schreiben:

$$\begin{aligned} W_{ij}^{N=1,2,3}(\omega) &= \frac{(1 + \delta_{N2}) U^2 P(\omega) - U \delta_{ij}}{2 (1 + \delta_{N2}) U P(\omega) - 1} \\ &= U \cdot \delta_{ij} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{(1 + \delta_{N2}) U^2 (t - i\delta)}{\omega^2 - 2(1 + \delta_{N2})U(t - i\delta) - 4(t - i\delta)^2} . \end{aligned} \quad (8.32)$$

Offensichtlich gilt die Relation $W_{ii}^{N=1,2,3}(\omega) = U - W_{ij}^{N=1,2,3}(\omega)$ für $i, j \in \{1, 2\}$; $i \neq j$.

8.3 G_0W_0 -Selbstenergie

Die gesuchte Selbstenergie in G_0W_0 -Näherung berechnet sich nach folgender Formel [Hed69]:

$$\Sigma^{G_0W_0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' W(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega') G_{U=0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega + \omega') e^{i\eta\omega'} , \quad (8.33)$$

bzw. in der Notation der Site-Spin-Darstellung

$$\Sigma_{ij\sigma}^{G_0W_0}(\omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' G_{ij\sigma}^{U=0}(\omega + \omega') W_{ij}(\omega') e^{i\eta\omega'} , \quad (8.34)$$

wobei für $W_{ij}(\omega)$ die spingemittelte Funktion benutzt wird [Röd05]. Daraus leiten wir für $\delta \rightarrow 0$ und $\eta \rightarrow 0$ die folgenden Ergebnisse ab (siehe Anhang F.1, Seite 87 f.) (mit $h := \sqrt{(2tU(1 + \delta_{N2}) + 4t^2)}$):

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij\uparrow, N=1,2}^{G_0W_0}(\omega) &= \Sigma_{ij\downarrow, N=2,3}^{G_0W_0}(\omega) \\ &= \frac{(1 + \delta_{N2})U^2t}{4h} \left(\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + h + t) + i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 - h - t) - i\delta} \right) - \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \end{aligned} \quad (8.35)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\omega) &= \frac{U^2t}{4h} \left(\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + h - t) + i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + h + t) + i\delta} \right) \end{aligned} \quad (8.36)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\omega) &= \frac{U^2t}{4h} \left(\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - h - t) - i\delta} + \frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 - h + t) - i\delta} \right) - \delta_{ij} \cdot U . \end{aligned} \quad (8.37)$$

An dieser Stelle sei erwähnt, dass die restlichen Matrixelemente mit entgegengesetzten Spinquantenzahlen wegen (5.1) Null ergeben.

Das Ergebnis für $N = 2$ (8.35) stimmt mit $\epsilon_0 = 0$ genau mit dem Resultat von [Tom07] überein. Anhand der sich hieraus ergebenden Polstellen können wir sofort die Abweichung von der exakten Selbstenergie feststellen (vgl. mit Kapitel 6).

Die aus der G_0W_0 -Näherung berechnete Selbstenergie stellt wie eingangs erwähnt die genäherten Austausch- und Korrelationsanteile dar. Dabei ist der U -lineare Term gleich dem Austausch- oder Fock-Term, während der U^2 -proportionale Ausdruck den G_0W_0 -genäherten Korrelationsanteil angibt [Bec10]. Die hieraus gewonnenen Fock-Terme der Selbstenergie $\Sigma_{ij\sigma}^F$ sind:

$$\begin{aligned}\Sigma_{ij\sigma,N=1}^F &= -\delta_{ij} \cdot \delta_{\sigma\uparrow} \cdot \frac{U}{2} & \Sigma_{ij\sigma,N=2}^F &= -\delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\ \Sigma_{ij\sigma,N=3}^F &= -\delta_{ij} \cdot (\delta_{\sigma\uparrow} \cdot U + \delta_{\sigma\downarrow} \cdot \frac{U}{2}),\end{aligned}\quad (8.38)$$

in Übereinstimmung mit den bereits errechneten Werten aus (7.24).

8.4 Folgerungen

Im folgenden sind die Realteile der G_0W_0 -Selbstenergie abzüglich des Fock-Terms in Abhängigkeit von $\frac{\omega}{t}$ aufgetragen, um wie beim exakten Fall nur den Korrelationsanteil der Selbstenergie graphisch zu veranschaulichen. Die Darstellung der Imaginärteile befindet sich im Anhang (siehe Kapitel F.3, Seite 89 f.). Analog zum exakten Fall wurden für die Abbildungen $\epsilon_0 = 0$ und $\delta = 0,04$ gesetzt.

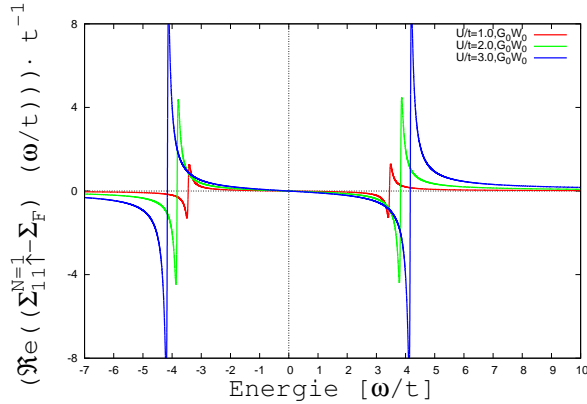


Abbildung 8.1: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\uparrow,N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}) - \Sigma_F)$

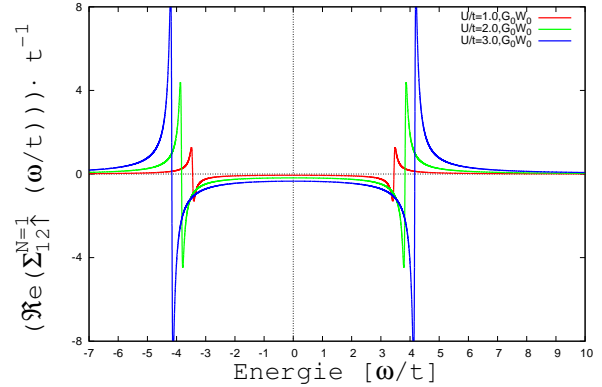


Abbildung 8.2: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\uparrow,N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

Vergleicht man die exakten Selbstenergien (siehe Kapitel 6, Seite 41 ff.) mit denen der G_0W_0 -Näherung, so kann man die unten beschriebenen Unterschiede feststellen. Offensichtlich erhalten wir bei Anwendung der G_0W_0 -Approximation im Gegensatz zur genauen Lösung von Null verschiedene Korrelationsanteile für $\Sigma_{ij\uparrow,N=1}^{G_0W_0}(\omega)$ und $\Sigma_{ij\downarrow,N=3}^{G_0W_0}(\omega)$ (siehe Abb. 8.1 und 8.2). Daraus können wir direkt schließen, dass unsere Näherung in dem Fall, in dem Wechselwirkung aufgrund des Pauli-Prinzips ausgeschlossen ist, unzutreffend ist.

Betrachten wir dagegen die umgekehrte Spinstellung, das heißt $\Sigma_{ij\downarrow,N=1}^{G_0W_0}(\omega)$ und $\Sigma_{ij\uparrow,N=3}^{G_0W_0}(\omega)$, so stellen wir fest, dass nun eine gute Näherung vorliegt (siehe Abb. 8.3, 8.4 und Abb. 8.7,

8 Die G_0W_0 -Näherung

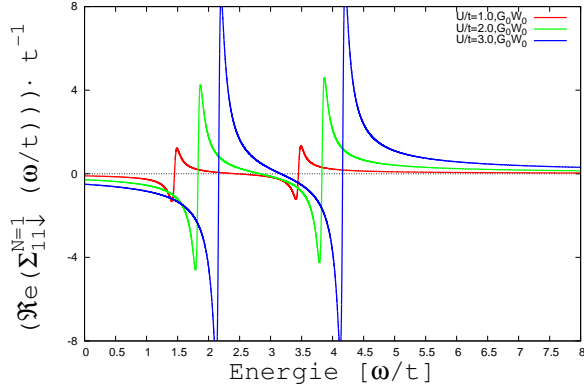


Abbildung 8.3: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

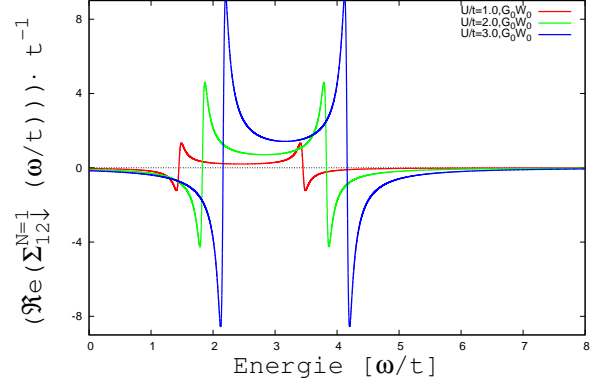


Abbildung 8.4: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

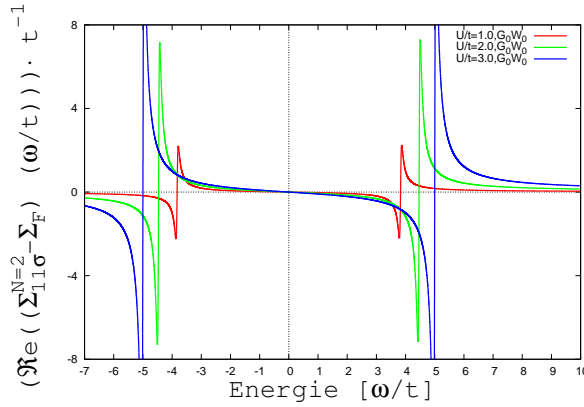


Abbildung 8.5: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\sigma, N=2}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}) - \Sigma_F)$

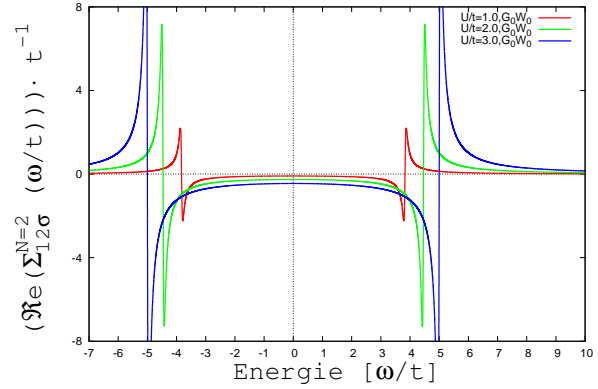
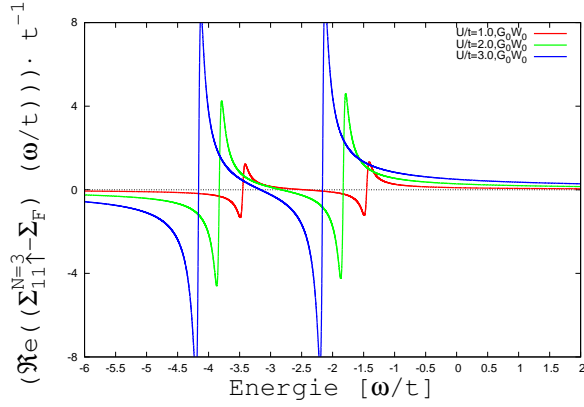
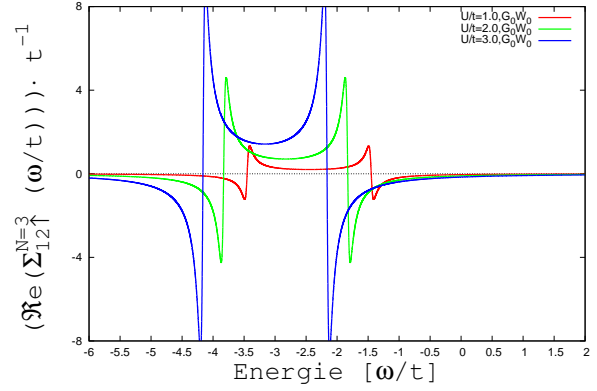


Abbildung 8.6: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\sigma, N=2}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

8.8). Wie bei der exakten Selbstenergie beträgt auch hier der energetische Abstand der Peaks konstant $\Delta\omega = 2t$. Die Nulldurchgänge der Peaks bzw. die Polstellen der Selbstenergie sind für $N = 1$ bei $\omega_1^{N=1} = -t + h + \epsilon_0$ und $\omega_2^{N=1} = t + h + \epsilon_0$ auszumachen, im Falle $N = 3$ dagegen bei $\omega_1^{N=3} = -t - h + \epsilon_0$ und $\omega_2^{N=3} = t - h + \epsilon_0$. Dabei wird auch erkennbar, dass im Grenzfall $U \rightarrow 0$ die Lagen der Peaks mit den Positionen des exakten Falls übereinstimmen.

Die Pole und damit die Nulldurchgänge der Korrelationspeaks von $\Sigma_{ij\uparrow, N=1,2}^{G_0W_0}(\omega)$ sind bei $\omega_1 = h + t + \epsilon_0$ und $\omega_2 = -h - t + \epsilon_0$ zu finden, woraus ein energetischer Abstand der Peaks von $\Delta\omega = 2(h + t)$ folgt (siehe Abb. 8.1, 8.2 und 8.5, 8.6). Wie man auch direkt sehen kann, gilt für den energetischen Abstand der Peaks im Grenzfall $U \rightarrow 0$ wegen $h_{U \rightarrow 0} = 2t$: $\Delta\omega_{U \rightarrow 0} = 6t$, so dass dieser Abstand offenbar für verschwindende Wechselwirkung U mit dem exakten Fall für $N = 2$ übereinstimmt.

Des Weiteren lässt sich sowohl graphisch als auch anhand der Terme ablesen, dass die in der G_0W_0 -Näherung analogen Symmetrie- bzw. Antisymmetrierelationen gültig sind. So können wir insgesamt feststellen, dass die G_0W_0 -Näherung genau in den Fällen eine relativ

Abbildung 8.7: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{11\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}) - \Sigma_F)$ Abbildung 8.8: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\Sigma_{12\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

gute Methode darstellt, in denen Wechselwirkung nicht durch das Pauli-Prinzip verboten ist. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass mit zunehmender Wechselwirkung U die Lage der Peaks stärker von der Lage der exakten Korrelationspeaks abweicht.

Zur Veranschaulichung der Relation zwischen den exakten und den G_0W_0 -genäherten Selbstenergien sind im Anhang F.4, Seite 90 f. die Differenzen der Realteile über $\frac{\omega}{t}$ abgebildet. Diese Größe können wir als eine approximative Vertexfunktion $\tilde{\Gamma}_{ij\sigma}(\omega)$ betrachten.

8 Die G_0W_0 -Näherung

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen des Hubbard-Modells wurden verschiedene physikalische Größen, insbesondere die Greensche Funktion und die Selbstenergie, exakt und in Hartree-Fock-Näherung bestimmt. Darüber hinaus ermittelten wir sowohl die abgeschirmte Wechselwirkung als auch die Selbstenergie in G_0W_0 -Näherung. Aufgrund der vereinfachten Voraussetzungen, die das Hubbard-Modell mit sich bringt, konnten diese Größen analytisch und ohne Zuhilfenahme numerischer Methoden berechnet werden.

Wir konnten zeigen, dass die Anwendung der Hartree-Fock-Näherung frequenzunabhängige Selbstenergien liefert, da sämtliche Korrelationen zu vernachlässigen sind. Zudem sind mit dieser Methode die Hartree-Fock-Terme aus den exakten Selbstenergien verifiziert worden. Auch die aus dieser Näherung gewonnenen Fock-Terme stimmen mit den Termen überein, die wir aus der G_0W_0 -Näherung abgeleitet haben.

Wie aus den Ergebnissen hervorgeht, stimmen im wechselwirkungsfreien Grenzfall die Näherungslösungen und das exakte Ergebnis erwartungsgemäß überein. Die exakte Lösung und die beiden Näherungsmethoden führen also zu einer in sich konsistenten Darstellungsmöglichkeit des Hubbard-Clusters.

Eine besondere Motivation besteht nun in der nachfolgenden Aufgabe, die Selbstenergie in der vollen GW -Näherung zu bestimmen, was ebenfalls analytisch möglich ist. Die Begründung ist offensichtlich, denn bei nicht vernachlässigter Wechselwirkung erhalten wir eine noch bessere Näherungsmethode im Vergleich zur G_0W_0 -Approximation. Außerdem könnte man bei Kenntnis der GW -genäherten Selbstenergie die genaue Vertexfunktion $\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega)$ bestimmen. Diese Vertexfunktion beschreibt das Verhältnis der Selbstenergien mit und ohne Vernachlässigung von Austausch und Korrelation und kann über eine Variationsableitung der Selbstenergie ermittelt werden. Das bedeutet, wir benötigen die Kenntnis der Veränderung von Σ mit der Variation von G . Die Kenntnis der exakten und der GW -Selbstenergie ermöglicht es uns, über deren Unterschiede qualitative Aussagen über die Vertexkorrekturen zu machen.

9 Zusammenfassung und Ausblick

A Berechnungen zur Hamilton-Matrix

In diesem Abschnitt sind nochmals exemplarisch einige Rechenschritte aufgeführt, die zur Bestimmung der Matrix des Hamilton-Operators

$$\hat{\mathcal{H}} = -t(c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} + c_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} + c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} + c_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}) + U(n_{1\downarrow} n_{1\uparrow} + n_{2\downarrow} n_{2\uparrow}) + \epsilon_0(n_{1\uparrow} + n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} + n_{2\downarrow}) \quad (\text{A.1})$$

benötigt wurden.

A.1 Für ein Elektron (N =1)

Bei einem Elektron gibt es die vier Basiszustände:

$$\begin{aligned} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, 0\rangle = |10, 00\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, 0\rangle = |01, 00\rangle \\ c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \uparrow\rangle = |00, 10\rangle & c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \downarrow\rangle = |00, 01\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Die Wirkung des Hamilton-Operators auf den Zustand $c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle \equiv |\uparrow, 0\rangle = |10, 00\rangle$ ergeben nacheinander die entsprechenden Zeilen der Matrix H :

$$\begin{aligned} -tc_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} |10, 00\rangle = 0 \\ -tc_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} |10, 00\rangle = -tc_{2\uparrow}^\dagger |00, 00\rangle = -t|00, 10\rangle = -t|0, \uparrow\rangle \\ -tc_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} |10, 00\rangle = 0 \\ -tc_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} |10, 00\rangle = 0 \\ Un_{1\downarrow} n_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= Un_{1\downarrow} n_{1\uparrow} |10, 00\rangle = Un_{1\downarrow} |10, 00\rangle = 0 \\ Un_{2\downarrow} n_{2\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= Un_{2\downarrow} n_{2\uparrow} |10, 00\rangle = 0 \\ \epsilon_0 n_{1\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{1\uparrow} |10, 00\rangle = \epsilon_0 |10, 00\rangle = \epsilon_0 |\uparrow, 0\rangle \\ \epsilon_0 n_{1\downarrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{1\downarrow} |10, 00\rangle = 0 \\ \epsilon_0 n_{2\uparrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{2\uparrow} |10, 00\rangle = 0 \\ \epsilon_0 n_{2\downarrow} c_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{2\downarrow} |10, 00\rangle = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}} |\uparrow, 0\rangle = \epsilon_0 |\uparrow, 0\rangle - t|0, \uparrow\rangle$$

A.2 Für zwei Elektronen (N = 2)

Im Falle von $N = 2$ Elektronen gibt es die im Text unter (4.9) beschriebenen folgenden sechs möglichen Basiszustände:

$$\begin{aligned}
 c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \downarrow\rangle = |10, 01\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \uparrow\rangle = |01, 10\rangle \\
 c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \uparrow\rangle = |10, 10\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \downarrow\rangle = |01, 01\rangle \\
 c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, 0\rangle = |11, 00\rangle & c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |0, \uparrow\downarrow\rangle = |00, 11\rangle .
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Den Hamilton-Operator (A.1) auf den Zustand $c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \equiv |0, \uparrow\downarrow\rangle = |00, 11\rangle$ angewandt ergibt die untenstehend aufgeführten Terme

$$\begin{aligned}
 -tc_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |00, 11\rangle = -tc_{1\uparrow}^\dagger |00, 01\rangle = -t|10, 01\rangle = -t|\uparrow, \downarrow\rangle \\
 -tc_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow}^\dagger |00, 11\rangle = 0 \\
 -tc_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |00, 11\rangle = +tc_{1\downarrow}^\dagger |00, 10\rangle = +t|01, 10\rangle = +t|\downarrow, \uparrow\rangle \\
 -tc_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= -tc_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger |00, 11\rangle = 0 \\
 Un_{1\downarrow} n_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= Un_{1\downarrow} n_{1\uparrow} |00, 11\rangle = 0 \\
 Un_{2\downarrow} n_{2\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= Un_{2\downarrow} n_{2\uparrow} |00, 11\rangle = Un_{2\downarrow} |00, 11\rangle = U|00, 11\rangle = U|0, \uparrow\downarrow\rangle \\
 \epsilon_0 n_{1\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{1\uparrow} |00, 11\rangle = 0 \\
 \epsilon_0 n_{1\downarrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{1\downarrow} |00, 11\rangle = 0 \\
 \epsilon_0 n_{2\uparrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{2\uparrow} |00, 11\rangle = \epsilon_0 |00, 11\rangle = \epsilon_0 |0, \uparrow\downarrow\rangle \\
 \epsilon_0 n_{2\downarrow} c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &= \epsilon_0 n_{2\downarrow} |00, 11\rangle = \epsilon_0 |00, 11\rangle = \epsilon_0 |0, \uparrow\downarrow\rangle
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}}|0, \uparrow\downarrow\rangle = (2\epsilon_0 + U)|0, \uparrow\downarrow\rangle - t|\uparrow, \downarrow\rangle + t|\downarrow, \uparrow\rangle$$

A.3 Zur Eigenvektorberechnung

Anbei eine kleine Ergänzung zur Berechnung der Eigenvektoren. Die normierten Eigenvektoren, die sich aus dem charakteristischen Polynom ergeben, lauten:

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{2,0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\frac{(c-U)^2}{16t^2}\right)}} \cdot (1, -1, 0, 0, \frac{c-U}{4t}, \frac{c-U}{4t}) & |\Psi_{2,3}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (1, 1, 0, 0, 0, 0) \\
 |\Psi_{2,1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\left(1+\frac{(c+U)^2}{16t^2}\right)}} \cdot (1, -1, 0, 0, -\frac{c+U}{4t}, -\frac{c+U}{4t}) & |\Psi_{2,4}\rangle &= (0, 0, 1, 0, 0, 0) \\
 |\Psi_{2,2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (0, 0, 0, 0, 1, -1) & |\Psi_{2,5}\rangle &= (0, 0, 0, 1, 0, 0) .
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

Mit $c = \sqrt{16t^2 + U^2}$, $a = \sqrt{2 \left(\frac{16t^2}{(c-U)^2} + 1 \right)}$ und $b = \sqrt{2 \left(\frac{16t^2}{(c+U)^2} + 1 \right)}$ und einer Umformung

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2 \left(1 + \frac{(c-U)^2}{16t^2} \right)}} &= \frac{4t}{2(c^2 - Uc)^{1/2}} = \frac{4t}{a(c-U)} \\ \frac{1}{\sqrt{2 \left(1 + \frac{(c+U)^2}{16t^2} \right)}} &= \frac{4t}{2(c^2 + Uc)^{1/2}} = \frac{4t}{b(c+U)} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

erhält man die angegebene Darstellung (4.13). Es sei hierbei erwähnt, dass im Grenzfall $U \rightarrow 0$ die Vorfaktoren allesamt den Wert $\frac{1}{2}$ annehmen:

$$\lim_{U \rightarrow 0} \frac{4t}{a(c-U)} = \lim_{U \rightarrow 0} \frac{4t}{b(c+U)} = \lim_{U \rightarrow 0} \frac{1}{a} = \lim_{U \rightarrow 0} \frac{1}{b} = \frac{1}{2}. \quad (\text{A.7})$$

Wie man erkennen kann, sind demnach die exakten Eigenvektoren im wechselwirkungsfreien Fall identisch mit den Eigenvektoren in der Hartree-Fock-Näherung (siehe Kapitel 7 ab Seite 49). Das Gleiche gilt auch für die Eigenwerte und wir finden

$$\lim_{U \rightarrow 0} E_{2,0} = 2\epsilon_0 - 2t \quad \text{und} \quad \lim_{U \rightarrow 0} E_{2,1} = 2\epsilon_0 + 2t. \quad (\text{A.8})$$

A.4 Für drei Elektronen ($N = 3$)

Für $N = 3$ Elektronen gibt es die unter (4.16) beschriebenen vier Basiszustände

$$\begin{aligned} c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle = |10, 11\rangle & c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle = |01, 11\rangle \\ c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle = |11, 10\rangle & c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle &\equiv |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle = |11, 01\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Die Anwendung von (A.1) auf den Zustand $c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle \equiv |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle = |10, 11\rangle$ ergibt die folgenden Ergebnisse:

$$\begin{aligned} -tc_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow} |10, 11\rangle &= +tc_{1\uparrow}^\dagger |10, 01\rangle = 0 \\ -tc_{2\uparrow}^\dagger c_{1\uparrow} |10, 11\rangle &= -tc_{2\uparrow}^\dagger |00, 11\rangle = 0 \\ -tc_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow} |10, 11\rangle &= -tc_{1\downarrow}^\dagger |10, 10\rangle = +t|11, 10\rangle = +t|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \\ -tc_{2\downarrow}^\dagger c_{1\downarrow} |10, 11\rangle &= 0 \\ Un_{1\downarrow} n_{1\uparrow} |10, 11\rangle &= Un_{1\downarrow} |10, 11\rangle = 0 \\ Un_{2\downarrow} n_{2\uparrow} |10, 11\rangle &= Un_{2\downarrow} |10, 11\rangle = U|10, 11\rangle = U|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \\ \epsilon_0 n_{1\uparrow} |10, 11\rangle &= \epsilon_0 |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \\ \epsilon_0 n_{1\downarrow} |10, 11\rangle &= 0 \\ \epsilon_0 n_{2\uparrow} |10, 11\rangle &= \epsilon_0 |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle \\ \epsilon_0 n_{2\downarrow} |10, 11\rangle &= \epsilon_0 |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{\mathcal{H}}|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle = (3\epsilon_0 + U)|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + t|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$$

A Berechnungen zur Hamilton-Matrix

B Berechnungen zu den Greenschen Funktionen

Aufgrund der zahlreichen Matrixelemente, die man zur Berechnung der Greensfunktionen benötigt und zugunsten einer besseren Übersicht werden hier beispielhaft einige wichtige Rechenschritte nachvollzogen.

B.1 Für ein Elektron ($N = 1$)

$$G_{11\uparrow}(\omega)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(\frac{4t}{a(c-U)} | 0, \downarrow \rangle + \frac{1}{a} | \downarrow, 0 \rangle \right) = 0 \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(\frac{4t}{b(c+U)} | 0, \downarrow \rangle - \frac{1}{b} | \downarrow, 0 \rangle \right) = 0 \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,2} \rangle &= \langle \Psi_{1,0} | \frac{1}{\sqrt{2}} | \downarrow, 0 \rangle = 0 \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,3} \rangle &= \langle \Psi_{1,0} | \frac{1}{\sqrt{2}} | 0, \downarrow \rangle = 0 \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,4} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) | 0, \uparrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,5} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) c_{1\uparrow} | \downarrow, \downarrow \rangle = 0 \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{0,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) | \uparrow, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

$$G_{12\uparrow}(\omega)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{2,4} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \langle \uparrow, \uparrow | \frac{-1}{\sqrt{2}} | \uparrow, \uparrow \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,4} \rangle \langle \Psi_{2,4} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle = -\frac{1}{2} \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{0,0} \rangle &= \langle 0, \uparrow | \frac{1}{\sqrt{2}} | 0, \uparrow \rangle = +\frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{0,0} \rangle \langle \Psi_{0,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{1,0} \rangle = +\frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

$$G_{11\downarrow}(\omega)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(-\frac{4t}{a(c-U)} | 0, \uparrow \rangle - \frac{1}{a} | \uparrow, 0 \rangle \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right) \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(-\frac{4t}{b(c+U)} | 0, \uparrow \rangle + \frac{1}{b} | \uparrow, 0 \rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}b} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)} \right) \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,2} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} | \uparrow, 0 \rangle \right) = -\frac{1}{2} \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,3} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | 0, \uparrow \rangle \right) = +\frac{1}{2} \\
 \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{0,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow, 0 | + \langle 0, \uparrow |) | \downarrow, 0 \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\boxed{G_{12\downarrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{2,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,0} \rangle \langle \Psi_{2,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle = \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\ \langle \Psi_{2,1} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}b} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,1} \rangle \langle \Psi_{2,1} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle = \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right)^2 \\ \langle \Psi_{2,2} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \frac{1}{2} \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,2} \rangle \langle \Psi_{2,2} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle = -\frac{1}{4} \\ \langle \Psi_{2,3} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \frac{-1}{2} \Rightarrow \langle \Psi_{1,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{2,3} \rangle \langle \Psi_{2,3} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle = -\frac{1}{4} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

B.2 Für zwei Elektronen (N = 2)

$$\boxed{G_{11\uparrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \langle 0, \uparrow\downarrow | 0, \uparrow\downarrow \rangle + \frac{4t}{\sqrt{2}a(c-U)} \langle \downarrow, \uparrow | \downarrow, \uparrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right) \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,1} \rangle &= \langle \Psi_{2,0} | \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} | \downarrow, \downarrow \rangle\right) = 0 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,2} \rangle &= \langle \Psi_{2,0} | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | 0, \uparrow\downarrow \rangle + | \downarrow, \uparrow \rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right) \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,3} \rangle &= \langle \Psi_{2,0} | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | \downarrow, \downarrow \rangle\right) = 0 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,0} \rangle &= \langle \Psi_{2,0} | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} | \uparrow, \uparrow \rangle\right) = 0 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \langle \uparrow\downarrow, 0 | \uparrow\downarrow, 0 \rangle + \frac{4t}{\sqrt{2}a(c-U)} \langle \uparrow, \downarrow | \uparrow, \downarrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right) \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,2} \rangle &= \langle \Psi_{2,0} | \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} | \uparrow, \uparrow \rangle\right) = 0 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,3} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \langle \uparrow\downarrow, 0 | \uparrow\downarrow, 0 \rangle - \frac{4t}{\sqrt{2}a(c-U)} \langle \uparrow, \downarrow | \uparrow, \downarrow \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\boxed{G_{12\uparrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle = \frac{-1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\ \langle \Psi_{3,2} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,2} \rangle \langle \Psi_{3,2} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle = \frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,1} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{2,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,1} \rangle \langle \Psi_{1,1} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,0} \rangle = \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\ \langle \Psi_{2,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,3} \rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}a} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right) \Rightarrow \langle \Psi_{2,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{1,3} \rangle \langle \Psi_{1,3} | c_{1\uparrow} | \Psi_{2,0} \rangle = \frac{-1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

B.3 Für drei Elektronen ($N = 3$)

$$\boxed{G_{11\uparrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{4,0} \rangle &= 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,1} \rangle \langle \Psi_{2,1} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right)^2 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,2} \rangle &= -\frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,2} \rangle \langle \Psi_{2,2} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle = \frac{1}{4} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,3} \rangle &= -\frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,3} \rangle \langle \Psi_{2,3} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle = \frac{1}{4} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle &= 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,5} \rangle &= 0
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\boxed{G_{12\uparrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle \langle \Psi_{2,0} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= -\frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)}\right)^2 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,1} \rangle \langle \Psi_{2,1} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= -\frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)}\right)^2 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,2} \rangle \langle \Psi_{2,2} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,3} \rangle \langle \Psi_{2,3} | c_{1\uparrow} | \Psi_{3,0} \rangle = \frac{1}{4} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | c_{2\uparrow}^\dagger | \Psi_{2,5} \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

$$\boxed{G_{11\downarrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{4,0} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | (-|\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,0} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | \left(-\frac{4t}{a(c-U)}|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle + \frac{1}{a}|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle\right) = 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,1} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | \left(-\frac{4t}{b(c+U)}|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle - \frac{1}{b}|\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle\right) = 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,2} \rangle &= 0 \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,2} \rangle \langle \Psi_{2,2} | c_{1\downarrow} | \Psi_{3,0} \rangle = 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,3} \rangle &= 0 \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,3} \rangle \langle \Psi_{2,3} | c_{1\downarrow} | \Psi_{3,0} \rangle = 0 \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle \langle \Psi_{2,4} | c_{1\downarrow} | \Psi_{3,0} \rangle = \frac{1}{2} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,5} \rangle &= 0 \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,5} \rangle \langle \Psi_{2,5} | c_{1\downarrow} | \Psi_{3,0} \rangle = 0
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

$$\boxed{G_{12\downarrow}(\omega)}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_{4,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{3,0} \rangle &= \langle \Psi_{4,0} | (|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{1\downarrow} | \Psi_{4,0} \rangle \langle \Psi_{4,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{3,0} \rangle = -\frac{1}{2} \\
 \langle \Psi_{3,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle &= \langle \Psi_{3,0} | |\uparrow, \uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \langle \Psi_{3,0} | c_{2\downarrow}^\dagger | \Psi_{2,4} \rangle \langle \Psi_{2,4} | c_{1\downarrow} | \Psi_{3,0} \rangle = \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

B Berechnungen zu den Greenschen Funktionen

C Die spektralen Gewichte

C.1 Summation über die Gewichte

Um zu verifizieren, dass die Summe über die spektralen Gewichte das behauptete Ergebnis (5.22) liefert, sind hier die entsprechenden Rechnungen abgebildet:

$$\boxed{N=1, N=3}$$

$$\begin{aligned}
 & \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) + \tilde{a}_{2\downarrow}^{N=1}(t, U) \\
 &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 + \frac{1}{2b^2} \left(1 - \frac{4t}{(c+U)} \right)^2 \\
 &= \frac{((c-U) + 4t)^2}{4(16t^2 + (c-U)^2)} + \frac{((c+U) - 4t)^2}{4(16t^2 + (c+U)^2)} \\
 &= \frac{256t^4 + 128t^3(c-U) + 16t^2[(c-U)^2 + (c+U)^2] + (c-U)(c+U)^2[8t + (c-U)]}{4(16t^2 + (c-U)^2)(16t^2 + (c+U)^2)} \\
 &+ \frac{256t^4 - 128t^3(c+U) + 16t^2[(c+U)^2 + (c-U)^2] + (c+U)(c-U)^2[(c+U) - 8t]}{4(16t^2 + (c-U)^2)(16t^2 + (c+U)^2)} \\
 &= \frac{2 \cdot [256t^4 + 32t^2(c^2 + U^2) + (c-U)^2(c+U)^2] - 256t^3U + 16tc^2U - 16tU^3}{4(16t^2 + (c-U)^2)(16t^2 + (c+U)^2)} \\
 &= \frac{1}{2},
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

$$\boxed{N=2}$$

$$\begin{aligned}
 & \tilde{a}_{1\downarrow}^{N=1}(t, U) + \tilde{a}_{2\sigma}^{N=2}(t, U) \\
 &= \frac{1}{2a^2} \left(1 + \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 + \frac{1}{2a^2} \left(1 - \frac{4t}{(c-U)} \right)^2 = \frac{1}{a^2} \cdot \left(1 + \left(\frac{4t}{(c-U)} \right)^2 \right) \\
 &= \frac{(c-U)^2 + 16t^2}{2 \cdot (16t^2 + (c-U)^2)} = \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

C Die spektralen Gewichte

D Zur Selbstenergie und den Greenschen Funktionen

D.1 Zur Berechnung der Selbstenergie ($N = 2$)

Der ursprüngliche Ausdruck für die Selbstenergie, der sich unmittelbar aus Gleichung (6.16) ergibt, lautet

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = & \\ & - \frac{(-64\delta^2 - 64ic\delta + 16c^2)t^2 + 4c^2\delta^2 + 4ic^3\delta - c^4}{4c(2c\omega - cU + (8i\delta - 6c)t - 2c\epsilon_0)} + \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\ & - \frac{(-64\delta^2 - 64ic\delta + 16c^2)t^2 + 4c^2\delta^2 + 4ic^3\delta - c^4}{4c(2c\omega - cU - (8i\delta - 6c)t - 2c\epsilon_0)} \cdot (-1)^{(i-j)} + (1 - \delta_{ij}) \cdot i\delta \frac{4t - c}{c} . \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Dieser auf den ersten Blick etwas unhandliche Ausdruck lässt sich für den Grenzfall $\delta \rightarrow 0$ leicht vereinfachen. So kommen wir mit Hilfe der Relation (6.18) zum Ergebnis, wie es in Gleichung (6.19) angegeben ist.

D.2 Die Real- und Imaginärteile von $\Sigma(\omega)$

In diesem Abschnitt sind die den Abbildungen 6.1 bis 6.12 zugrunde liegenden Real- und Imaginärteile der Selbstenergien angegeben. Auch hierbei ist stets der Limes $\delta \rightarrow 0$ zu betrachten. Es ergeben sich dabei bei allen Selbstenergien jeweils zwei Singularitäten, die in Form zweier Peaks im Funktionsverlauf erscheinen und die Elektronenkorrelation veranschaulichen.

Zu N=1

Die Real- und Imaginärteile zu $N = 1$ sind

$$\begin{aligned}
 \Re \Sigma_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) &= \Im \Sigma_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) = 0 \\
 \Re \Sigma_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \\
 \frac{U^2}{8} \left[\frac{(\omega - \frac{U}{2} - 3t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} - 3t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{(\omega - \frac{U}{2} - t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} - t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right] &+ \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\
 \Im \Sigma_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \\
 \frac{U^2}{8} \left[\frac{-\delta}{(\omega - \frac{U}{2} - 3t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{-\delta}{(\omega - \frac{U}{2} - t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right] &. \quad (D.2)
 \end{aligned}$$

Die Korrelationsanteile der Selbstenergie $\Sigma_c(\omega)$ genügen den folgenden Symmetrierelationen bezüglich ω :

$$\begin{aligned}
 \Re \Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=1}(\omega - \frac{U}{2} - 2t - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot \Re \Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=1}(-\omega - \frac{U}{2} - 2t - \epsilon_0) \\
 \Im \Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=1}(\omega - \frac{U}{2} - 2t - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j)} \cdot \Im \Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=1}(-\omega - \frac{U}{2} - 2t - \epsilon_0) \quad . \quad (D.3)
 \end{aligned}$$

Demnach ist der Realteil antisymmetrisch und der Imaginärteil symmetrisch in $\omega_s^{N=1} = \frac{U}{2} + 2t + \epsilon_0$, sofern die Site-Indizes identisch sind. Bei verschiedenen Site-Indizes hingegen ist der Realteil symmetrisch und der Imaginärteil antisymmetrisch in $\omega_s^{N=1}$.

Zu N=2

Im Falle $N = 2$ finden wir

$$\begin{aligned}
 \Re \Sigma_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) &= \\
 - \frac{\{[(16c^2 - 64\delta^2)t^2 + 4c^2\delta^2 - c^4](2c\omega - cU - 6ct - 2c\epsilon_0) + 8\delta t(4c^3\delta - 64c\delta t^2)\}}{\{4c[(2c\omega - cU - 6ct - 2c\epsilon_0)^2 + 64\delta^2 t^2]\}} &+ \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\
 - \frac{\{[(16c^2 - 64\delta^2)t^2 + 4c^2\delta^2 - c^4](2c\omega - cU + 6ct - 2c\epsilon_0) - 8\delta t(4c^3\delta - 64c\delta t^2)\}}{\{4c[(2c\omega - cU + 6ct - 2c\epsilon_0)^2 + 64\delta^2 t^2]\}} &\cdot (-1)^{(i-j)} \\
 \xrightarrow{\delta \rightarrow 0} \frac{U^2}{8} \left[\frac{(\omega - \frac{U}{2} - 3t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} - 3t - \epsilon_0)^2 + \eta^2} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{(\omega - \frac{U}{2} + 3t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} + 3t - \epsilon_0)^2 + \eta^2} \right] &+ \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2}, \quad (D.4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Im \Sigma_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) &= \\
 + \frac{\{-(2cU)^2\delta(2\omega - U - 6t - 2\epsilon_0) - 8\delta t[(cU)^2 - 4\delta^2 U^2]\}}{4c^3[(2\omega - U - 6t - 2\epsilon_0)^2 + 4\eta^2]} &+ (1 - \delta_{ij}) \cdot \delta \frac{(4t - c)}{c} \\
 + \frac{\{-(2cU)^2\delta(2\omega - U + 6t - 2\epsilon_0) - 8\delta t[-(cU)^2 + 4\delta^2 U^2]\}}{4c^3[(2\omega - U + 6t - 2\epsilon_0)^2 + 4\eta^2]} &\cdot (-1)^{(i-j)}, \quad (D.5)
 \end{aligned}$$

D.3 Spezialfälle der Greenschen Funktionen

mit dem bereits eingeführten $\eta := \frac{4\delta t}{c}$. Die Symmetriebetrachtungen ergeben in diesem Falle:

$$\begin{aligned}\Re\Sigma_{ij\sigma,c}^{N=2}(\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot \Re\Sigma_{ij\sigma,c}^{N=2}(-\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0) \\ \Im\Sigma_{ij\sigma,c}^{N=2}(\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot \Im\Sigma_{ij\sigma,c}^{N=2}(-\omega - \frac{U}{2} - \epsilon_0) \quad .\end{aligned}\quad (D.6)$$

Anders als bei $N = 1$ sind nun bei gleichen Ortsvariablen sowohl der Real- als auch der Imaginärteil antisymmetrisch in $\omega_s^{N=2} = \frac{U}{2} + \epsilon_0$. Unterscheiden sich i und j , sind beide Teile symmetrisch in $\omega_s^{N=2}$.

Zu N=3

Für den letzten verbliebenen Fall $N = 3$ sind die Real- und Imaginärteile

$$\begin{aligned}\Re\Sigma_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \\ \frac{U^2}{8} \left[\frac{(\omega - \frac{U}{2} + t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} + t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{(\omega - \frac{U}{2} + 3t - \epsilon_0)}{(\omega - \frac{U}{2} + 3t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right] + \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\ \Re\Sigma_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) &= \delta_{ij} \cdot U \quad \Im\Sigma_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) = 0 \\ \Im\Sigma_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \\ \frac{U^2}{8} \left[\frac{\delta}{(\omega - \frac{U}{2} + t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + (-1)^{(i-j)} \cdot \frac{\delta}{(\omega - \frac{U}{2} + 3t - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right] .\end{aligned}$$

Zu guter Letzt finden wir für die Symmetrie in ω :

$$\begin{aligned}\Re\Sigma_{ij\uparrow,c}^{N=3}(\omega - \frac{U}{2} + 2t - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j+1)} \cdot \Re\Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=3}(-\omega - \frac{U}{2} + 2t - \epsilon_0) \\ \Im\Sigma_{ij\uparrow,c}^{N=3}(\omega - \frac{U}{2} + 2t - \epsilon_0) &= (-1)^{(i-j)} \cdot \Im\Sigma_{ij\downarrow,c}^{N=3}(-\omega - \frac{U}{2} + 2t - \epsilon_0) \quad ,\end{aligned}\quad (D.7)$$

im Einklang mit den Verhältnissen des Falles $N = 1$, nur gelten hier die Symmetrien im Punkt $\omega_s^{N=3} = \frac{U}{2} - 2t + \epsilon_0$.

D.3 Spezialfälle der Greenschen Funktionen

Interessant sind natürlich auch die Grenzfälle der Greenschen Funktionen für verschwindende Parameter U und t . Das heißt, man möchte sehen, wie sich die Greenschen Funktionen im wechselwirkungsfreien Fall einerseits ($U \rightarrow 0$) und im atomaren Limes ($t \rightarrow 0$) andererseits verhalten.

Wechselwirkungsfreier Fall ($U \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned}
 G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) &= \lim_{U \rightarrow 0} G_{ij\uparrow}^{N=2}(\omega) = \lim_{U \rightarrow 0} G_{ij\downarrow}^{N=2}(\omega) = \lim_{U \rightarrow 0} G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right] \\
 \lim_{U \rightarrow 0} G_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) + i\delta} \right] \\
 \lim_{U \rightarrow 0} G_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + t) - i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 - t) - i\delta} \right]
 \end{aligned} \tag{D.8}$$

Atomarer Limes ($t \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned}
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - \epsilon_0 + i\delta} + \frac{1}{\omega - \epsilon_0 - i\delta} \right] \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{11\downarrow}^{N=1}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + U) + i\delta} \right] \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{12\downarrow}^{N=1}(\omega) &= 0 \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{11\uparrow}^{N=2}(\omega) &= \lim_{t \rightarrow 0} G_{11\downarrow}^{N=2}(\omega) \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + U) + i\delta} + \frac{1}{\omega - \epsilon_0 - i\delta} \right] \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{12\uparrow}^{N=2}(\omega) &= \lim_{t \rightarrow 0} G_{12\downarrow}^{N=2}(\omega) = 0 \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{11\uparrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + U) - i\delta} + \frac{1}{\omega - \epsilon_0 - i\delta} \right] \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{12\uparrow}^{N=3}(\omega) &= 0 \\
 \lim_{t \rightarrow 0} G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) &= \frac{1}{2} \left[\frac{(-1)^{(i-j)}}{\omega - (\epsilon_0 + U) + i\delta} + \frac{1}{\omega - (\epsilon_0 + U) - i\delta} \right]
 \end{aligned} \tag{D.9}$$

Die Relationen in (D.8) verdeutlichen uns, dass im wechselwirkungsfreien Fall die Funktionen $G_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) = G_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) = G_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega)$ identisch sind. Wie zu sehen, beträgt die Elektron/Loch-Anregungslücke in allen Fällen konstant $2t$. Allerdings haben wir zu beachten, dass die Pole mit $+i\delta$ den Elektronenanregungen und die Pole mit $-i\delta$ den Lochanregungen entsprechen.

Im atomaren Limes (D.9) sind die Gegebenheiten anders. Erwartungsgemäß verschwinden in diesem Grenzfall die Greenschen Funktionen, sofern unterschiedliche Ortsindizes $i \neq j$ vorliegen. Darüber hinaus können wir unmittelbar erkennen, dass in den Fällen, in denen Wechselwirkung nicht durch das Pauli-Prinzip verboten ist, die Anregungsenergien um den vollen Wechselwirkungsparameter U auseinanderliegen.

E Zu den Spektralfunktionen

E.1 Symmetrierelationen

Bei den Spektralfunktionen existieren die gleichen Symmetrierelationen bezüglich der Energie ω wie bei den Greenschen Funktionen. So gilt:

$$\begin{aligned} \rho_{ij\uparrow}^{N=1}(-\omega) &= \rho_{ij\uparrow}^{N=1}(\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = 0 & \rho_{ij\downarrow}^{N=1}(-\omega) &= \rho_{ij\uparrow}^{N=3}(\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -\frac{U}{2} \\ \rho_{ij\sigma}^{N=2}(-\omega) &= \rho_{ij\sigma}^{N=2}(\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -\frac{U}{2} \\ \rho_{ij\downarrow}^{N=3}(-\omega) &= \rho_{ij\downarrow}^{N=3}(\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -U & \rho_{ij\uparrow}^{N=3}(-\omega) &= \rho_{ij\downarrow}^{N=1}(\omega) \quad \text{für } \epsilon_0 = -\frac{U}{2}. \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

E.2 Darstellung

Um die Spektralfunktionen dimensionslos darzustellen, werden die Energie ω und die Koppelung U in Einheiten von t aufgetragen. Bei den Abbildungen aus Kapitel 5.5, Seite 37 ff. trägt man daher $\tilde{\rho}_{ij\sigma} = t \cdot \rho_{ij\sigma}$ über den Achsenparametern $\tilde{U} = \frac{U}{t}$ und $\tilde{\omega} = \frac{\omega}{t}$ auf. Im folgenden ist exemplarisch eine Spektralfunktion als Funktion dieser Größen dargestellt, wobei stets $t > 0$ gilt. Analog zur obigen Notation gilt auch $\tilde{\epsilon}_0 = \frac{\epsilon_0}{t}$.

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{11\downarrow}(\tilde{\omega}) &= t \cdot \rho_{11\downarrow}(\tilde{\omega}) = \frac{(\sqrt{16 + \tilde{U}^2} - \tilde{U} + 4)^2}{4(16 + (\sqrt{16 + \tilde{U}^2} - \tilde{U})^2)} \cdot \delta(\tilde{\omega} - (\frac{1}{2}(\tilde{U} - \sqrt{16 + \tilde{U}^2}) + \tilde{\epsilon}_0 + 1)) \\ &+ \frac{(\sqrt{16 + \tilde{U}^2} + \tilde{U} - 4)^2}{4(16 + (\sqrt{16 + \tilde{U}^2} + \tilde{U})^2)} \cdot \delta(\tilde{\omega} - (\frac{1}{2}(\tilde{U} + \sqrt{16 + \tilde{U}^2}) + \tilde{\epsilon}_0 + 1)) \\ &+ \frac{1}{4} \cdot \delta(\tilde{\omega} - (\tilde{U} + \tilde{\epsilon}_0 + 1)) + \frac{1}{4} \cdot \delta(\tilde{\omega} - (\tilde{\epsilon}_0 + 1)) \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Da keine unendlich scharfen Delta-Peaks dargestellt werden können, werden diese bei den Spektralfunktionen durch Lorenz-Kurven ersetzt. Zur approximativen Darstellung benutzt man dabei die Formel

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}. \quad (\text{E.3})$$

E Zu den Spektralfunktionen

F Zur G_0W_0 -Näherung

F.1 Die Berechnung von $\Sigma^{G_0W_0}(\omega)$

Dieser Abschnitt enthält eine exemplarische Berechnung des Selbstenergie-Matrixelements $\Sigma_{ii\uparrow, N=1}^{G_0W_0}(\omega)$. Um $\Sigma^{G_0W_0}(\omega)$ auszurechnen, erweist es sich als Vorteil, die Partialbruchzerlegung zu verwenden. Wir definieren $z^2 := -2U(t - i\delta) - 4(t - i\delta)^2$ und erhalten als Zwischenergebnis

$$\begin{aligned}
& \Sigma_{ii\uparrow, N=1}^{G_0W_0}(\omega) \\
&= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{ii\uparrow}^{N=1}(\omega + \omega') W_{ii}(\omega') e^{i\eta\omega'} d\omega' \\
&= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{U^2(t - i\delta)}{4iz} \cdot \frac{1}{(\omega + iz - (\epsilon_0 - t) - i\delta)} \left(\frac{-1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 - t) - i\delta)} + \frac{1}{(\omega' - iz)} \right) \right. \\
&= \frac{U^2(t - i\delta)}{4iz} \cdot \frac{1}{(\omega + iz - (\epsilon_0 + t) + i\delta)} \left(\frac{-1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 + t) + i\delta)} + \frac{1}{(\omega' - iz)} \right) \\
&- \frac{U^2(t - i\delta)}{4iz} \cdot \frac{1}{(\omega - iz - (\epsilon_0 - t) - i\delta)} \left(\frac{-1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 - t) - i\delta)} + \frac{1}{(\omega' + iz)} \right) \\
&- \left. \frac{U^2(t - i\delta)}{4iz} \cdot \frac{1}{(\omega - iz - (\epsilon_0 + t) + i\delta)} \left(\frac{-1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 + t) + i\delta)} + \frac{1}{(\omega' + iz)} \right) \right] \\
&+ \frac{U}{2} \cdot \frac{1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 - t) - i\delta)} + \frac{U}{2} \cdot \frac{1}{(\omega + \omega' - (\epsilon_0 + t) + i\delta)} \Big] \cdot e^{i\eta\omega'} d\omega'.
\end{aligned} \tag{F.1}$$

Zum Integral tragen nur die Pole auf der oberen ω' -Halbebene bei. Wir benötigen den Wert der Variablen z . Der Real- und der Imaginärteil von z^2 ist

$$\begin{aligned}
& \Re(z^2) = -2Ut - 4(t^2 - \delta^2) < 0 \quad ; \quad \Im(z^2) = 2\delta(U + 4t) > 0. \\
& \Rightarrow \varphi_{z^2} = \pi + \arctan \left(\frac{2\delta(U + 4t)}{-2Ut - 4(t^2 - \delta^2)} \right).
\end{aligned} \tag{F.2}$$

So erhalten wir als Näherungslösung für $z_{0,1}$ den Wert

$$\begin{aligned}
& z_{0,1} = \pm \sqrt{(2tU + 4t^2)} \cdot \left(\frac{\delta(4t + U)}{2Ut + 4(t^2 - \delta^2)} + i \right) \text{ mit } \Re(z_0) > 0 \\
& \text{und } \lim_{\delta \rightarrow 0} (iz_0) = -\sqrt{2tU + 4t^2}.
\end{aligned} \tag{F.3}$$

F Zur G_0W_0 -Näherung

Mit Hilfe der Funktionentheorie [Tim03, Fre06] kann man die anstehenden Integrale auswerten. So gilt mit $b := \delta + i(\omega - (\epsilon_0 - t))$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\eta\omega'}}{\omega' - ib} d\omega' = 2\pi i \cdot e^{-\eta b} \approx 2\pi i \quad \text{für } \eta \rightarrow 0 \quad (\text{F.4})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\eta\omega'}}{\omega' - iz_0} d\omega' = 2\pi i \cdot e^{-\eta z_0} \approx 2\pi i \quad \text{für } \eta \rightarrow 0, \quad (\text{F.5})$$

und wir erhalten das in (8.35) angegebene Resultat.

F.2 Real- und Imaginärteile von $\Sigma^{G_0W_0}(\omega)$

An dieser Stelle sind explizit die Real- und Imaginärteile der G_0W_0 -genäherten Selbstenergien (8.35) bis (8.37) aufgetragen.

Sie lauten mit $h := \sqrt{2t(1 + \delta_{N2})U + 4t^2}$:

$$\begin{aligned} \Re \Sigma_{ij\uparrow, N=1,2}^{G_0W_0}(\omega) &= \Re \Sigma_{ij\downarrow, N=2,3}^{G_0W_0}(\omega) = \\ &= \frac{(1 + \delta_{N2})U^2 t}{4h} \left(\frac{\omega - t - h - \epsilon_0}{(\omega - t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{(-1)^{(i-j)} \cdot (\omega + t + h - \epsilon_0)}{(\omega + t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right) - \delta_{ij} \cdot \frac{U}{2} \\ \Im \Sigma_{ij\uparrow, N=1,2}^{G_0W_0}(\omega) &= \Im \Sigma_{ij\downarrow, N=2,3}^{G_0W_0}(\omega) = \\ &= \frac{(1 + \delta_{N2})U^2 t}{4h} \left(\frac{-\delta}{(\omega - t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{\delta \cdot (-1)^{(i-j)}}{(\omega + t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right) \\ \Re \Sigma_{ij\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\omega) &= \\ &= \frac{U^2 t}{4h} \left(\frac{\omega + t - h - \epsilon_0}{(\omega + t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{(-1)^{(i-j)} \cdot (\omega - t - h - \epsilon_0)}{(\omega - t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right) \\ \Im \Sigma_{ij\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\omega) &= \\ &= \frac{U^2 t}{4h} \left(\frac{-\delta}{(\omega + t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{-\delta \cdot (-1)^{(i-j)}}{(\omega - t - h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

$$\begin{aligned} \Re \Sigma_{ij\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\omega) &= \\ &= \frac{U^2 t}{4h} \left(\frac{\omega + t + h - \epsilon_0}{(\omega + t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{(-1)^{(i-j)} \cdot (\omega - t + h - \epsilon_0)}{(\omega - t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right) - \delta_{ij} \cdot U \\ \Im \Sigma_{ij\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\omega) &= \\ &= \frac{U^2 t}{4h} \left(\frac{\delta}{(\omega + t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} + \frac{\delta \cdot (-1)^{(i-j)}}{(\omega - t + h - \epsilon_0)^2 + \delta^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

F.3 Graphische Darstellung der Imaginärteile

In diesem Abschnitt sind die zu Kapitel 8.3 und 8.4 gehörenden Imaginärteile von $\Sigma_{ij\uparrow}^{G_0W_0}(\omega)$ über $\frac{\omega}{t}$ abgebildet. Wie bei den Realteilen wurden auch hier die Größen $\epsilon_0 = 0$ und $\delta = 0,04$ gesetzt.

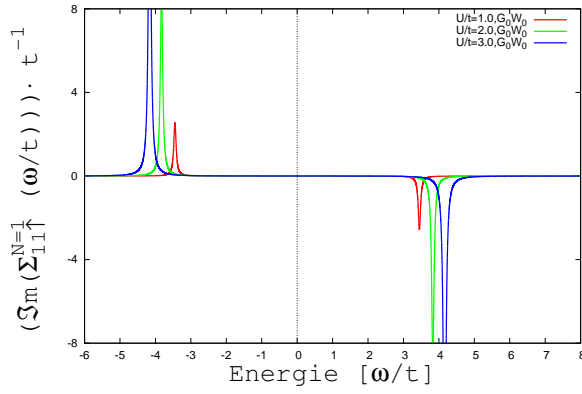


Abbildung F.1: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{11\uparrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

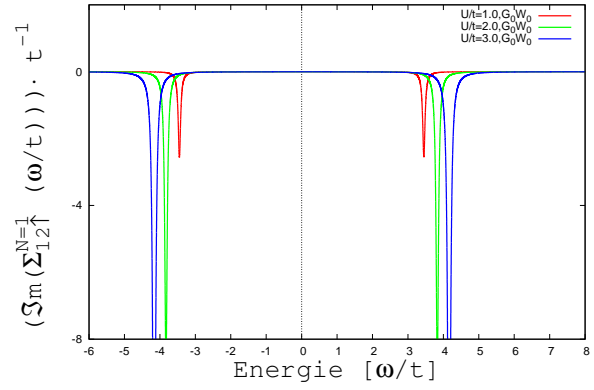


Abbildung F.2: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{12\uparrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

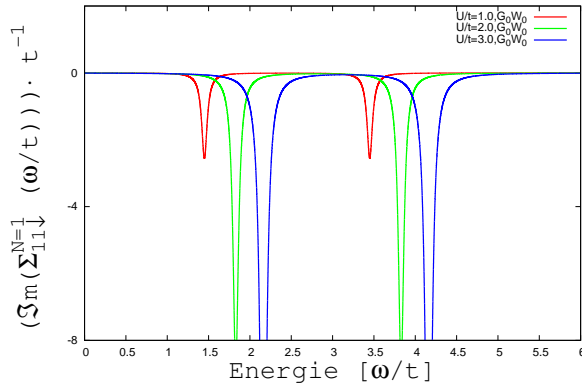


Abbildung F.3: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{11\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

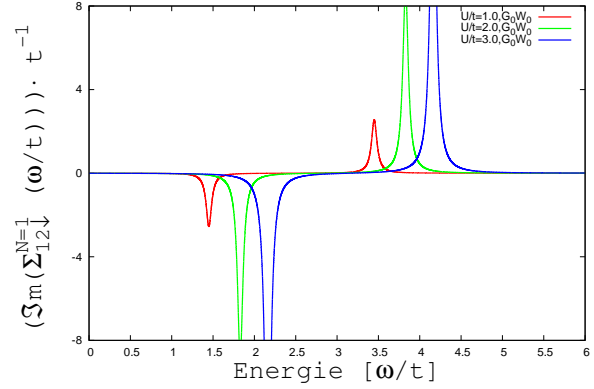


Abbildung F.4: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{12\downarrow, N=1}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

F Zur G_0W_0 -Näherung

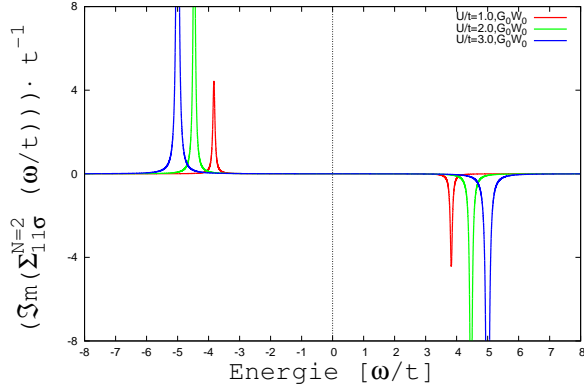


Abbildung F.5: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{11\sigma, N=2}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

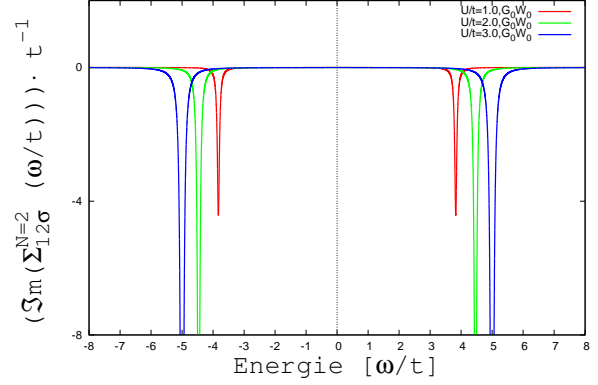


Abbildung F.6: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{12\sigma, N=2}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

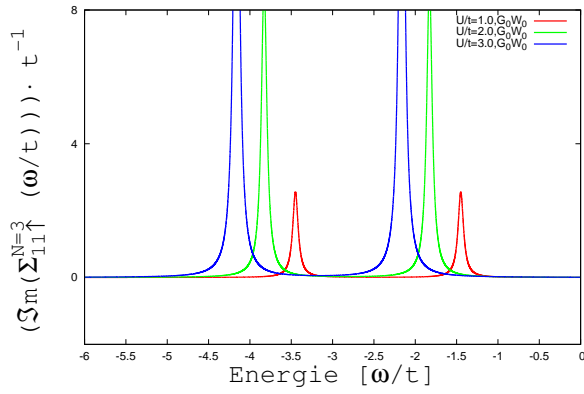


Abbildung F.7: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{11\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

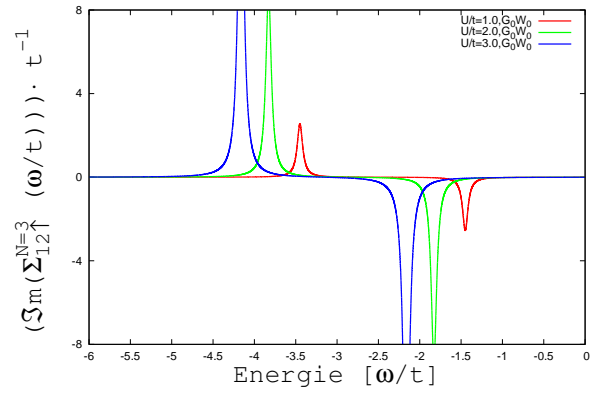


Abbildung F.8: $\frac{1}{t} \cdot \Im m(\Sigma_{12\uparrow, N=3}^{G_0W_0}(\tilde{\omega}))$

F.4 Modifizierte Vertex-Funktionen in der G_0W_0 -Näherung

Die berechneten Austausch- und Korrelationsanteile der Selbstenergie liegen uns sowohl in exakter Form ($\Sigma_{ij\sigma}(\omega) - \Sigma_{ij\sigma}^H$), als auch in G_0W_0 -Näherung ($\Sigma_{ij\sigma}^{G_0W_0}(\omega)$) vor. Um sich deren Verhältnis zueinander veranschaulichen zu können, definieren wir eine genäherte Vertex-Funktion als Differenz dieser Anteile: $\tilde{\Gamma}_{ij\sigma}(\omega) := \Sigma_{ij\sigma}(\omega) - \Sigma_{ij\sigma}^H - \Sigma_{ij\sigma}^{G_0W_0}(\omega)$. Trägt man den Realteil der modifizierten Vertex-Funktion $\Re \tilde{\Gamma}_{ij\sigma}(\omega)$ als Funktion der Energie $\frac{\omega}{t}$ auf, so können wir unmittelbar die Unterschiede zwischen Näherung und exakter Lösung in Form der abweichenden Selbstenergie-Polstellen bzw. der Korrelationspeaks ablesen (siehe Abb. F.9 bis F.14).

F.4 Modifizierte Vertex-Funktionen in der G_0W_0 -Nherung

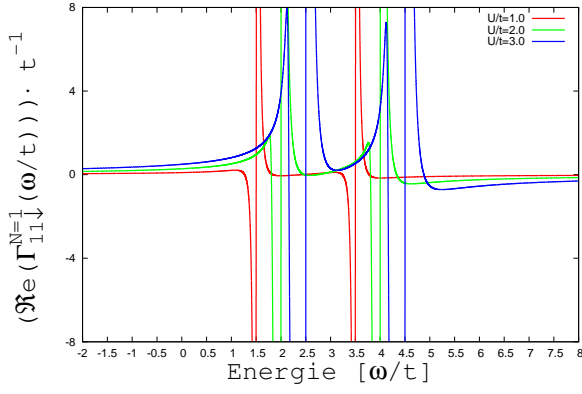


Abbildung F.9: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{11\downarrow, N=1}(\tilde{\omega}))$

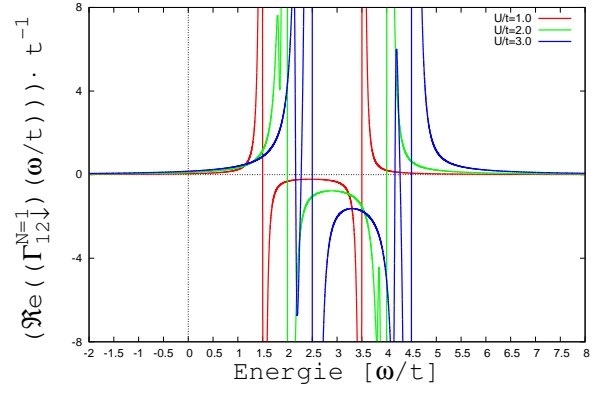


Abbildung F.10: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{12\downarrow, N=1}(\tilde{\omega}))$

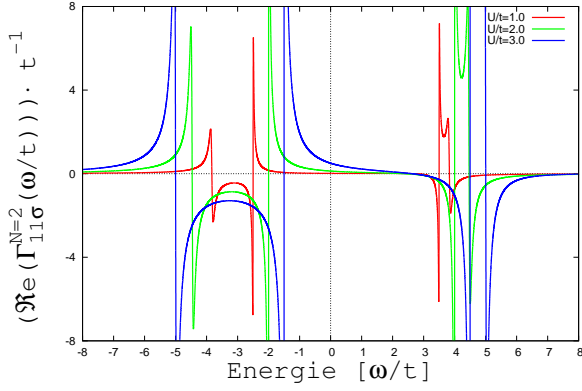


Abbildung F.11: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{11\sigma, N=2}(\tilde{\omega}))$

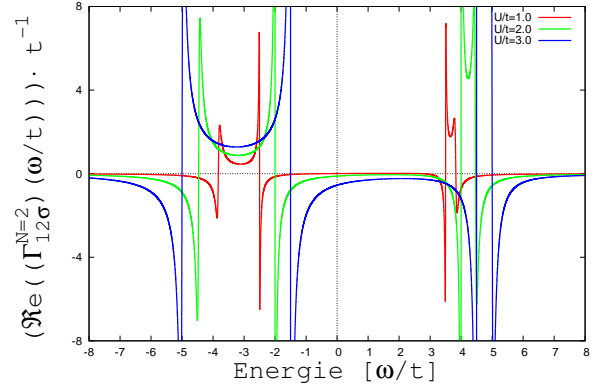


Abbildung F.12: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{12\sigma, N=2}(\tilde{\omega}))$

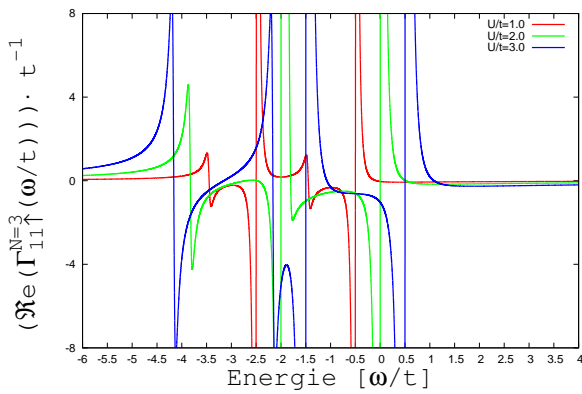


Abbildung F.13: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{11\uparrow, N=3}(\tilde{\omega}))$

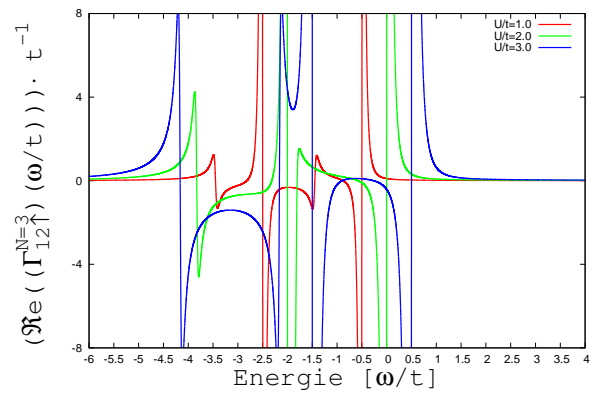


Abbildung F.14: $\frac{1}{t} \cdot \Re(\tilde{\Gamma}_{12\uparrow, N=3}(\tilde{\omega}))$

F Zur G_0W_0 -Näherung

Literaturverzeichnis

- [Rom09] *P. Romaniello*: THE HUBBARD MOLECULE; Manuskript, École Polytechnique, France, 2009
- [Hub63] *J. Hubbard*: ELECTRON CORRELATIONS IN NARROW ENERGY BANDS; Proc. R. Soc., 276, 238-257, London, 1963
- [Ber74] *U. Bernstein, P. Pincus*: THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE DIMERIZED HALF-FILLED-BAND HUBBARD CHAIN; Phys. Rev. B, Vol. 10, 8; Los Angeles, 1974
- [Lie68] *E. H. Lieb, F. Y. Wu*: ABSENCE OF MOTT TRANSITION IN AN EXACT SOLUTION OF THE SHORT-RANGE, ONE-BAND MODEL IN ONE DIMENSION; Phys. Rev. Lett. Vol. 20, 25; Boston, 1968
- [Lan71] *W. D. Langer, D. C. Mattis*: GROUND STATE ENERGY OF HUBBARD MODEL; Physics Letters, Vol 36A, 2; Kopenhagen, New York, 1971
- [Schw08] *F. Schwabl*: QUANTENMECHANIK FÜR FORTGESCHRITTENE; Springer Verlag, Berlin, 2008
- [Czy08] *G. Czycholl*: THEORETISCHE FESTKÖRPERPHYSIK; Springer Verlag, Berlin, 2008
- [Mah90] *G. Mahan*: MANY-PARTICLE PHYSICS; Plenum Press, New York, 1990
- [Abr63] *A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski*: METHODS OF QUANTUM FIELD THEORY IN STATISTICAL PHYSICS; Dover Publications, New York, 1963
- [Sch06] *C. Friedrich, A. Schindlmayr*: MANY-BODY PERTURBATION THEORY: THE GW-APPROXIMATION; Computational Nanoscience, Jülich, 2006
- [Bec10] *F. Bechstedt*: AUSTAUSCH UND KORRELATION IN FESTKÖRPERN; Vorlesungsskript, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2010
- [Bec05] *F. Bechstedt*: SPIN- UND ZEITABHÄNGIGE DICHTEFUNKTIONALTHEORIE; Vorlesungsskript, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2005
- [Bec99] *F. Bechstedt*: ELEMENTARE ANREGUNGEN IN FESTKÖRPERN; Vorlesungsskript, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 1999
- [Tom07] *J. M. Tomczak*: SPECTRAL AND OPTICAL PROPERTIES OF CORRELATED MATERIALS; Dissertation, Ecole Polytechnique, France, 2007

Literaturverzeichnis

- [Nol09] *W. Nolting*: GRUNDKURS THEORETISCHE PHYSIK 7, VIELTEILCHENTHEORIE; Springer Verlag, Berlin, 2009
- [Hon07] *A. Honecker*: VIELTEILCHENTHEORIE DES FESTKÖRPERS; Vorlesungsskript, Göttingen, 2007
- [Fet03] *A. L. Fetter, J. D. Walecka*: QUANTUM THEORY OF MANY-PARTICLE SYSTEMS; Dover Publications, Mineola, N.Y., 2003
- [Mie01] *A. Mielke*: STARKE KORRELATIONEN UND MAGNETISMUS Vorlesungsskript; Heidelberg, 2001
- [Elk79] *K. Elk, W. Gasser*: DIE METHODE DER GREENSCHEN FUNKTIONEN IN DER FESTKÖRPERPHYSIK; Akademie-Verlag, Berlin, 1979
- [Kit89] *Ch. Kittel, C. Y. Fong*: QUANTENTHEORIE DER FESTKÖRPER; Oldenbourg Verlag, München, 1989
- [Lin97] *A. Lindner*: GRUNDKURS THEORETISCHE PHYSIK; Teubner Verlag, Stuttgart, 1997
- [Tim03] *S. Timmann*: REPETITORIUM DER FUNKTIONENTHEORIE; Binomi Verlag, Hannover, 2003
- [Fis00] *G. Fischer*: LINEARE ALGEBRA; Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 2000
- [Pow09] *B. J. Powell*: AN INTRODUCTION TO EFFECTIVE LOW-ENERGY HAMILTONIANS IN CONDENSED MATTER PHYSICS AND CHEMISTRY; arXiv:0906.1640v3
- [Don98] *S. Doniach, E. H. Sondheimer*: GREEN'S FUNCTIONS FOR SOLID STATE PHYSICISTS; Imperial College Press, 1998
- [Fre06] *E. Freitag, R. Busam*: FUNKTIONENTHEORIE 1; Springer Verlag, Heidelberg, 2006
- [Hed69] *L. Hedin, S. Lundqvist*: EFFECTS OF ELECTRON-ELECTRON AND ELECTRON-PHONON INTERACTIONS ON THE ONE-ELECTRON STATES OF SOLIDS; Solid State Physics, Volume 23, (Academic Press, New York), 1969
- [Röd05] *C. Rödl*: SPINABHÄNGIGE GW-APPROXIMATION; Diplomarbeit, Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2005
- [Max09] <http://maxima.sourceforge.net>: MAXIMA VERSION 5.22.1; 2009

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Menschen danken, die in unterschiedlicher Weise zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Friedhelm Bechstedt, der mir die Möglichkeit gab, an diesem interessanten Thema zu arbeiten und mir stets mit Ratschlägen zur Seite stand.

Vielen Dank auch an Herrn Dr. Karsten Hannewald für die Übernahme der Zweitkorrektur sowie den hilfreichen Anmerkungen und Vorschlägen.

Des Weiteren möchte ich mich bei allen Kollegen und Mitarbeitern innerhalb unserer Arbeitsgruppe für die gute und angenehme Atmosphäre bedanken.

Viel zu verdanken habe ich natürlich auch meinen Freunden. Danke für die schöne Zeit, die wir bisher miteinander hatten und hoffentlich auch weiterhin haben werden.

Ein großes Dankeschön gebührt meiner Familie, insbesondere meinen Eltern, die mich stets unterstützt und mir dieses Studium ermöglicht haben.

Erklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Jena, den 15. März 2011

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die vorliegende Diplomarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena, den 15. März 2011